Alma Mater Studiorum · Università di Bologna

Scuola di Scienze Dipartimento di Fisica e Astronomia Corso di Laurea in Fisica

INTEGRALI DI CAMMINO IN MECCANICA QUANTISTICA

Relatore:
Prof. Fiorenzo Bastianelli

Presentata da: Valeria Rossi

Quando arrivi a un bivio, imboccalo — Yogi Berra

Sommario

In questa tesi viene presentato il metodo dell'integrale di cammino di Feynman come alternativa alla formulazione canonica hamiltoniana della meccanica quantistica. Partendo dall'articolo originale di Dirac, viene sviluppata la teoria delle trasformazioni di contatto e la sua trattazione corretta per arrivare a definire una ampiezza di probabilità di transizione tra i punti dello spazio tempo (\vec{x}'',t) e (\vec{x}'',t) . Tale ampiezza di probabilità (il nucleo di Feynman) viene poi usata per costruire una funzione d'onda, che si dimostra essere soluzione dell'equazione di Schrödinger (provando in questo modo l'equivalenza tra i due formalismi). Il numero di sistemi risolvibili con questo strumento, dimostratisi valido, è ampliato dall'implementazione di una teoria per la trattazione perturbativa del potenziale. Quanto esposto precedentemente è poi applicato alla trattazione di due sistemi fondamentali della meccanica: la particella libera e l'oscillatore armonico. Sono esposti due diversi metodi di risoluzione, applicabili in generale alle lagrangiane quadratiche. Infine, si generalizza la definizione di integrale di cammino per superfici curve a coordinate arbitrarie e per coordinate sferiche e si usa quanto appreso per risolvere il sistema dell'oscillatore armonico radiale.

Indice

1	Intr	roduzione	4
2	L'in	L'integrale di cammino	
	2.1	Teoria lagrangiana classica	8
	2.2	Teoria delle trasformazioni	11
	2.3	L'ampiezza di probabilità	14
	2.4	L'equazione di Schrödinger	17
	2.5	Teoria Perturbativa	19
	2.6	Limite Classico	21
3	Esempi basilari		
	3.1	Particella libera	22
	3.2	Oscillatore armonico	24
4	Coordinate non cartesiane e spazi curvi		26
	4.1	Coordinate generiche per una varietà riemanniana	26
	4.2	Coordinate sferiche	33
		4.2.1 Oscillatore armonico radiale	36
C	Conclusioni		
Bibliografia			40

Capitolo 1

Introduzione

Nel 1925-26 Schrödinger, Heisenberg e altri sviluppano un'approccio hamiltoniano alla nuova teoria della meccanica quantistica. Lo stato del sistema è descritto da una funzione a valori complessi Ψ , che evolve, per velocità non relativistiche, in accordo con l'equazione di Schrödinger

$$\frac{\partial \Psi(\vec{x},t)}{\partial t} = -\frac{i}{\hbar} \hat{H} \Psi(\vec{x},t) = -\frac{i}{\hbar} \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi(\vec{x},t) + V(\vec{x},t) \Psi(\vec{x},t) \right]$$
(1.1)

Il tipo di relazione differenziale che intercorre tra l'evoluzione temporale e quella spaziale della Ψ è tipica di un'onda, per questo motivo la funzione descrittiva del sistema è meglio conosciuta come funzione d'onda. L'interpretazione dell'equazione di Schrödinger non è immediata. Siccome prevede che il moto di una particella venga descritto da un'onda, identifica due oggetti che in meccanica classica sono nettamente distinti. Alla Ψ viene dato il significato di un'ampiezza di probabilità; $|\Psi(\vec{x}',t')|^2$ è la probabilità che la particella si trovi in \vec{x}' al tempo t'. Di per sè la (1.1) è un'equazione deterministica (la conoscenza di Ψ in t' implica la conoscenza della Ψ in t''), ma la sua interpretazione in termini probabilistici introduce un fattore di indeterminatezza. Il risultato di un esperimento non può essere previsto con certezza, ha senso calcolare solo le probabilità associate a ciascun esito. La probabilità per un particolare evento è data dal considerare tutti i diversi modi in cui quell'evento si può verificare. Le varie alternative (e.g. il passaggio dell'elettrone attraverso una delle due fessure nel celebre esperimento alla Young), però, non si compongono come previsto dalla teoria di Laplace

$$P = P_1 + P_2 {,} {(1.2)}$$

ma piuttosto al modo delle onde $P = |\Psi|^2 = |\Psi_1 + \Psi_2|^2$. Effettuare un esperimento significa disturbare irrimediabilmente il sistema e con esso la sua ampiezza di probabilità: la conoscenza certa del valore di un osservabile lascia altri aspetti del sistema nell'ombra, ponendo un limite intrinseco all'accuratezza di qualsiasi misurazione. Limitiamoci a

voler risolvere il moto di una particella nello spazio-tempo. I concetti espressi sopra (cioè il principio di sovrapposizione e il principio di indeterminazione di Heisenberg) si traducono nel modo seguente. Una particella che sia emessa in $a=(\vec{x}_a,t_a)$ e registrata da un detector in $b = (\vec{x}_b, t_b)$ può essere studiata supponendo che essa abbia compiuto questo spostamento seguendo una certa traiettoria $\vec{x}(t)$. La probabilità associata al suo essere trovata in b è il risultato del contributo di ogni possibile cammino che la particella potrebbe aver intrapreso. A ognuno di essi quindi va associata un'ampiezza, che andrà sommata con le altre per dare la $\Psi(\vec{x}_b, t_b)$. Effettuare un esperimento per localizzare l'oggetto di studio in un punto intermedio c significa distruggere l'interferenza tra alternative, modificando il modo in cui esse sono sommate. Questo tipo di approccio (a molte storie) alla meccanica quantistica, presentato da Feynman nella sua tesi di dottorato e in [4], introduce in maniera naturale la quantizzazione attraverso il concetto di "alternative", e lo fa ereditando le immagini della meccanica classica. Per questo risulta spesso decisamente più intuitivo rispetto alla formulazione usuale. L'elettrone e gli altri oggetti tipicamente quantistici sono ancora rassicuranti particelle localizzate, ma molto più "liberi": esplorano tutti i cammini possibili, senza le restrizioni imposte dal principio di minima azione, e sono descritti da una funzione d'onda che non è altro che il risultato della somma delle ampiezze su tutte queste alternative. L'approccio qualitativo è chiaro, ma sorgono due importanti questioni non appena ci si accinge a mettere in pratica il metodo. La prima riguarda il modo in cui si definiscono i cammini e la somma su di essi. Consideriamo una particella, confinata in un piano, che va da $a = (x_a, y_a, t_a)$ a $b = (x_b, y_b, t_b)$. Tra questi punti, in x_c , può essere posto uno schermo che impedisca alla particella di andare oltre. Se su questo sbarramento vengono praticati due fori, grandi appena da consentire il passaggio, si possono costruire due cammini spaziali collegando in linea retta $(x_a, y_a), (x_c, y_{c1})$ o $(x_c, y_{c2}), (x_b, y_b)$. Aumentando il numero di accessi attraverso lo schermo fino ad eliminarlo del tutto si arrivano a considerare tutte le opzioni di passaggio in x_c . Per completare la popolazione dei cammini spaziali il processo va ripetuto riempiendo densamente il tragitto a-b di schermi fino ad avere delle funzioni continue y(x). Per ottenere delle traiettorie si deve tenere conto anche della dipendenza temporale con un procedimento analogo di discretizzazione e limite verso il continuo (che in questo frangente può essere pensato come il dotare le fessure di porte a tempo che rimangano aperte a istanti sempre più ravvicinati). Dal punto di vista matematico, sommare su tutti i cammini significa integrare nello spazio delle funzioni $\vec{x}(t)$, con tutte le difficoltà nella definizione di una misura appropriata che questo comporta. Nonostante una tale misura esista, in genere si preferisce l'approccio reticolare qui introdotto per l'identificazione dei cammini. La seconda questione concerne il valore da dare a ciascuna ampiezza. Seguendo il risultato di Dirac, che in [3] nel tentativo di perseguire una teoria lagrangiana della meccanica quantistica individua in $\exp[iS[x(t)]/\hbar]$ l'analogo classico del propagatore, Feynman postula che a ogni cammino debba essere assegnato lo stesso peso e una fase complessa proporzionale all'azione calcolata classicamente. La formulazione

a integrale sui cammini della meccanica quantistica assume quindi la forma

$$K(\vec{x}'', \vec{x}'; t'', t') = \langle \vec{x}'', t' | \vec{x}', t' \rangle = \int_{\vec{x}(t') = \vec{x}'}^{\vec{x}(t'') = \vec{x}''} \mathcal{D}\vec{x}(t) \exp\left[\frac{i}{\hbar}S[\vec{x}(t)]\right]$$
(1.3)

e l'ampiezza di probabilità che il sistema evolva da (\vec{x}',t') a (\vec{x}',t') prende il nome di nucleo di Feynman. Nonostante questa sia solo una descrizione alternativa della meccanica quantistica, equivalente alla notazione operatoriale diventata canonica con [2], essa sembra esprimere tutta la sua potenza solo in campi più avanzati, dove il metodo usuale non è altrettanto efficace (e.g. nella cosmologia quantistica). L'integrale di cammino, inoltre, si presta alle più disparate applicazioni al solo prezzo di dover definire un appropriato principio variazionale: meccanica statistica¹, teoria delle probabilità classica, scienze dei materiali e studio del mercato finanziario sono solo alcuni dei campi in questo metodo può essere usato estensivamente.

In questa tesi si vuole introdurre l'integrale di cammino come metodo per la descrizione della meccanica quantistica. Il primo capitolo è dedicato alla presentazione della teoria come formulazione lagrangiana della meccanica quantistica: partendo dall'articolo di Dirac [3], si costruisce l'integrale funzionale come limite della definizione reticolare e si mostra come il risultato sia una particolare funzione d'onda; si dimostra l'equivalenza della formulazione in esame rispetto alla meccanica ondulatoria provando che la funzione d'onda descritta tramite il nucleo obbedisce all'equazione di Schrödinger e si sviluppa una teoria perturbativa che ampli il numero dei sistemi risolvibili. Nel secondo capitolo vengono proposti due esempi di applicazioni di quanto esposto nel capitolo precedente. Due sistemi fondamentali della meccanica, la particella libera e l'oscillatore armonico, vengono risolti ciascuno con un diverso approccio. Nell'ultimo capitolo si introduce il complesso problema della definizione dell'integrale di cammino su varietà curve. Nel cercare di scrivere il nucleo in coordinate generiche, risulta che la scelta di una regola di ordinamento per gli operatori stabilisce implicitamente l'uso di un certo reticolo, e l'uso di tale reticolo nella costruzione dell'integrale fa emergere una correzione al potenziale di ordine \hbar^2 (propria della convenzione stabilita per l'ordinamento). Si specifica poi il propagatore per coordinate sferiche e lo si usa per risolvere l'oscillatore armonico radiale. In tutta la tesi coordinate spaziali e temporali vengono indicizzate separatamente. Nella sezione "Coordinate generiche per una varietà riemanniana" la metrica viene indicata con g_{ab} , il suo inverso con g^{ab} , e il suo determinante con g. Indici preceduti da una virgola definiscono una derivazione. Γ^a_{bc} è il simbolo di Christoffel mentre R è la curvatura scalare

$$\Gamma_{bc}^{a} = \frac{1}{2} g^{ad} (g_{bd,c} + g_{cd,b} - g_{ac,d})
R = g^{ab} (\Gamma_{cb,c}^{c} - \Gamma_{ab,c}^{c} + \Gamma_{db}^{c} \Gamma_{ac}^{d} - \Gamma_{ab}^{c} \Gamma_{dc}^{d})$$
(1.4)

¹Dopo una rotazione di Wick $t \to -i\tau$, l'identificazione di τ^{-1} con il prodotto di costante di Boltzmann e temperatura $(\tau = \beta)$ restituisce subito la funzione di partizione.

 Γ_a è il simbolo di Christoffel contratto $\Gamma_a := \Gamma^a_{aa} = \frac{\partial \ln \sqrt{g}}{\partial q^a}$.

Capitolo 2

L'integrale di cammino

2.1 Teoria lagrangiana classica

La formulazione principe della meccanica per sistemi classici è data da un principio variazionale, detto di minima azione. Secondo questo principio ogni sistema descritto dalle coordinate generalizzate \vec{q} è caratterizzato da una funzione, detta lagrangiana

$$L(\vec{q}, \dot{\vec{q}}, t) \tag{2.1}$$

ed evolve nel tempo in modo che, fissati gli estremi del moto $\vec{q}(t_1) = \vec{q}_1$ e $\vec{q}(t_2) = \vec{q}_2$, l'integrale

$$S = \int_{t_1}^{t_2} L(q, \dot{q}, t) dt \tag{2.2}$$

abbia un valore estremale¹. Ciò significa che la traiettoria classica $\vec{q}(t)$ è la funzione per cui il funzionale (2.2), conosciuto con il nome di azione, è stazionario. Limitandoci per semplicità a una sola dimensione, una qualsiasi $q(t) + \delta q(t)$ che voglia essere funzione di prova in (2.2) deve soddisfare la scelta dei punti estremali, quindi

$$\delta q(t_1) = 0
\delta q(t_2) = 0$$
(2.3)

La richiesta di stazionarietà si traduce in

$$\delta S = \delta \int_{t_1}^{t_2} L(q, \dot{q}, t) = \int_{t_1}^{t_2} L(q + \delta q, \dot{q} + \delta \dot{q}, t) - \int_{t_1}^{t_2} L(q, \dot{q}, t) = 0$$
 (2.4)

o, sviluppando in serie al primo ordine

$$\int_{t_1}^{t_2} \left(\frac{\partial L}{\partial q} \delta q + \frac{\partial L}{\partial \dot{q}} \delta \dot{q} \right) dt = 0$$
 (2.5)

¹Per ogni porzione sufficientemente piccola della traiettoria si parla di minimo, da cui il nome del principio. In ogni caso nella derivazione delle equazioni del moto si fa uso solo della stazionarietà.

Se si procede all'integrazione per parti del secondo integrando si ottiene

$$\delta S = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}} \delta q |_{t_1}^{t_2} + \int_{t_1}^{t_2} \left(\frac{\partial L}{\partial q} - \frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}} \right) \delta q dt = 0$$
 (2.6)

Il primo termine si annulla in virtù di (2.3), il secondo lo fa per ogni δq solo a patto che

$$\frac{d}{dt}\frac{\partial L}{\partial \dot{q}} - \frac{\partial L}{\partial q} = 0 \tag{2.7}$$

Nota la lagrangiana, la (2.7) stabilisce la relazione tra coordinate, velocità e accelerazioni; costituisce cioè la legge del moto. Per essere completamente risolta, tale equazione necessita di due condizioni, ovvero della specificazione dello stato del sistema in un istante $t = t_0$. Il principio di minima azione, quindi, implica che l'evoluzione del sistema sia completamente determinata dalla lagrangiana e dalle condizioni iniziali dello stesso.

Dalla (2.7) appare ovvio che la moltiplicazione della lagrangiana per una costante non influisce sulle equazioni del moto. Tale indeterminatezza corrisponde all'arbitrarietà nella scelta dell'unità di misura, dato che l'additività dell'integrale stabilisce che la costante in questione debba essere la stessa per tutti i sistemi isolati.

La lagrangiana (2.1) descrittiva del sistema si compone di un termine T indicativo dell'energia cinetica delle sue parti e di uno proprio dell'interazione tra le stesse -U. Indicizzando con i ciascuna di queste

$$L = \sum_{i} \frac{m_i}{2} v_i^2 - U(\vec{q}_1, \vec{q}_2, ..., \vec{q}_i, ...)$$
 (2.8)

Questa equazione si fa carico di un tempo omogeneo ed isotropo e di interazioni a propagazione istantanea.

Si definisce l'impulso generalizzato come

$$p_i = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \tag{2.9}$$

Passando dalla descrizione del sistema con coordinate e velocità a una con coordinate e impulsi tramite una trasformazione di Legendre, si ottiene come funzione descrittiva della meccanica del sistema in esame l'hamiltoniana

$$H(p,q,t) = \sum_{i} p_i \dot{q}_i - L \tag{2.10}$$

da cui le relazioni

$$\dot{q}_{i} = \frac{\partial H}{\partial p_{i}}$$

$$\dot{p}_{i} = -\frac{\partial H}{\partial q_{i}}$$
(2.11)

che costituiscono le equazioni del moto.

La scelta delle coordinate generalizzate $q_1, q_2...q_D$ non è in alcun modo obbligata. Esse possono infatti essere sostituite da altrettante grandezze indipendenti $Q_1, Q_2...Q_D$ che definiscano univocamente la posizione del sistema. Chiamati P_i i momenti coniugati alle nuove coordinate, se vale

$$\dot{Q}_{i} = \frac{\partial H'}{\partial P_{i}}
\dot{P}_{i} = -\frac{\partial H'}{\partial Q_{i}}$$
(2.12)

con H'(P,Q) nuova hamiltoniana, allora la trasformazione che connette q_i, p_i, Q_i e P_i conserva la forma canonica delle equazioni di Hamilton (2.11). Una trasformazione di questo tipo viene detta canonica ed è caratterizzata da una funzione generatrice F. A seconda della dipendenza della funzione generatrice, le trasformazioni canoniche vengono classificate in quattro tipi $(F_1(\vec{q}, \vec{Q}, t), F_2(\vec{q}, \vec{P}, t), F_3(\vec{Q}, \vec{p}, t), F_4(\vec{p}, \vec{P}, t))$. La trasformazione è data esplicitamente dalle

$$p_{i} = \frac{\partial}{\partial q_{i}} F_{1}(\vec{q}, \vec{Q}, t) \qquad P_{i} = -\frac{\partial}{\partial Q_{i}} F_{1}(\vec{q}, \vec{Q}, t) \qquad H' = H + \frac{\partial}{\partial t} F_{1}(\vec{q}, \vec{Q}, t)$$

$$p_{i} = \frac{\partial}{\partial q_{i}} F_{2}(\vec{q}, \vec{P}, t) \qquad Q_{i} = \frac{\partial}{\partial P_{i}} F_{2}(\vec{q}, \vec{P}, t) \qquad H' = H + \frac{\partial}{\partial t} F_{2}(\vec{q}, \vec{P}, t)$$

$$q_{i} = -\frac{\partial}{\partial p_{i}} F_{3}(\vec{Q}, \vec{p}, t) \qquad P_{i} = -\frac{\partial}{\partial Q_{i}} F_{3}(\vec{Q}, \vec{p}, t) \qquad H' = H + \frac{\partial}{\partial t} F_{3}(\vec{Q}, \vec{p}, t)$$

$$q_{i} = -\frac{\partial}{\partial p_{i}} F_{4}(\vec{p}, \vec{P}, t) \qquad Q_{i} = \frac{\partial}{\partial P_{i}} F_{4}(\vec{p}, \vec{P}, t) \qquad H' = H + \frac{\partial}{\partial t} F_{4}(\vec{p}, \vec{P}, t) \qquad (2.13)$$

La $F_2(\vec{q}, \vec{P})$ è alla base della teoria di Hamilton-Jacobi, in cui si considera l'evoluzione di \vec{p} e \vec{q} nel tempo come una trasformazione canonica generata dall'azione S valutata sulla traiettoria classica (funzione principale di Hamilton) e cambiata di segno.

Le due formulazioni della meccanica classica, quella lagrangiana e quella hamiltoniana, sono quindi equivalenti. Ci sono tuttavia ragioni per preferire la prima²: in teorie relativistiche il funzionale d'azione lagrangiano è manifestamente un invariante relativistico, cosa non immediatamente evidente nella formulazione hamiltoniana, in cui il tempo assume un carattere distintivo rispetto allo spazio, inoltre la (2.7) fornisce uno strumento immediato per la determinazione degli integrali primi del moto.

²Dirac in [3] suggeriva anche che la lagrangiana permettesse di esprimere le leggi del moto tramite un unico principio variazionale. In realtà un principio variazionale esiste anche nello spazio delle fasi.

2.2 Teoria delle trasformazioni

Visti i vantaggi della formulazione lagrangiana, si vuole trovare il suo equivalente nella teoria quantistica. Questa idea fu alla base del lavoro originale di Dirac, che pose le basi per la formulazione di un integrale funzionale come successivamente sviluppato da Feynman. Ridiscuteremo il lavoro di Dirac, e per metterlo in contesto riprendiamo anche il concetto di trasformazioni canoniche in meccanica hamiltoniana. Si è detto che, per meritare questo appellativo, una trasformazione deve conservare la forma delle (2.11), le quali sono derivabili dal principio di minima azione in forma hamiltoniana. Considerando una trasformazione del primo tipo, questo significa che devono essere valide entrambe le

$$\delta \int \left(\sum_{i} p_{i} dq_{i} - H dt \right) = 0, \qquad \delta \int \left(\sum_{i} P_{i} dQ_{i} - H' dt \right) = 0$$
 (2.14)

Ciò è vero solo a patto che le espressioni integrande differiscano solo per il differenziale totale di una funzione arbitraria, la quale si rivela essere proprio la generatrice $F_1(q, Q, t)$. Infatti la

$$\sum_{i} p_{i} dq_{i} - H dt = \sum_{i} P_{i} dQ_{i} - H' dt + dF_{1}$$
(2.15)

riarrangiata come

$$dF_1 = \sum_{i} p_i dq_i - \sum_{i} P_i dQ_i + (H' - H)dt$$
 (2.16)

ha come palese conseguenza la prima fila della (2.13). L'evoluzione nel tempo di impulsi e coordinate può essere interpretata come una trasformazione canonica dando a (q, p) il significato di $(q_{t'}, p_{t'})$ e a (Q, P) quello di $(q_{t''}, q_{t''})$, visto che questi ultimi sono funzioni dei primi e del tempo trascorso t'' - t' := T

$$q_{t''} = q(q_{t'}, p_{t'}, T), p_{t''} = p(q_{t'}, p_{t'}, T)$$
 (2.17)

La canonicità della trasformazione è assicurata dalla forma del differenziale della funzione principale di Hamilton

$$dS = \sum p_{t''} dq_{t''} - p_{t'} dq_{t'} \tag{2.18}$$

che, dal confronto con la (2.16), risulta essere la funzione generatrice della trasformazione cambiata di segno. Un tentativo di trasposizione diretta della teoria lagrangiana in termini quantistici richiederebbe derivate parziali della lagrangiana rispetto a coordinate e velocità, che però, contrariamente a quanto accade in meccanica classica, non hanno significato fisico per via del principio di indeterminazione. L'unica differenziazione rispetto a variabili dinamiche che non perda di senso è quella coinvolta nelle parentesi di Poisson, il cui utilizzo porta alla quantizzazione canonica (che è quindi una teoria hamiltoniana della meccanica quantistica). Escluso un approccio diretto, Dirac propone in [3] una teoria delle trasformazioni di contatto in forma quantistica.

Presi due sistemi di coordinate indipendenti $\{q_i\}$ e $\{Q_i\}$ che descrivano il sistema, esiste una rappresentazione che diagonalizza contemporaneamente tutti gli operatori associati \hat{q}_i con autovalori q_i e un'altra che diagonalizza invece gli \hat{Q}_i con autovalori Q_i . La trasformazione che connette le due rappresentazioni viene indicata con (q'|Q'). Per funzioni di \hat{q} e di \hat{Q} vale, dalla relazione di completezza

$$\begin{pmatrix} q'|f(\hat{q})g(\hat{Q})|Q' \end{pmatrix} = \int \int (q'|f(\hat{q})|q'') dq'' (q''|Q'') dQ'' \left(Q''|g(\hat{Q})|Q' \right)
= f(q')g(Q') (q'|Q')$$
(2.19)

ovvero, vista l'additività dell'integrale.

$$\left(q'|\alpha(\hat{q},\hat{Q})|Q'\right) = \alpha(q',Q')\left(q'|Q'\right) \tag{2.20}$$

Questa relazione e' valida se le variabili sono ordinate opportunamente (le q a sinistra e le Q a destra) e relaziona a ogni funzione degli operatori una funzione delle variabili numeriche. Per le coordinate e i rispettivi impulsi si ottengono i risultati

$$(q'|\hat{q}_{i}|Q') = q'_{i}(q'|Q')$$

$$(q'|\hat{p}_{i}|Q') = -ih\frac{\partial}{\partial q'_{i}}(q'|Q')$$

$$(q'|\hat{Q}_{i}|Q') = Q'_{i}(q'|Q')$$

$$(q'|\hat{P}_{i}|Q') = ih\frac{\partial}{\partial Q'_{i}}(q'|Q')$$

$$(2.21)$$

Ora sia $(q'|Q') = e^{\frac{i}{\hbar}U}$. La trasformazione per l'impulso diventa

$$(q'|\hat{p}_i|Q') = \frac{\partial U(q',Q')}{\partial q_i'} (q'|Q')$$

$$(q'|\hat{P}_i|Q') = -\frac{\partial U(q',Q')}{\partial Q_i'} (q'|Q')$$
(2.22)

La (2.20) permette di notare che

$$\hat{p}_{i} = \frac{\partial U(\hat{q}, Q)}{\partial \hat{q}_{i}}$$

$$\hat{P}_{i} = -\frac{\partial U(\hat{q}, \hat{Q})}{\partial \hat{Q}_{i}}$$
(2.23)

Queste equazioni hanno la stessa forma delle (2.13), il che mostra l'esistenza di una forte connessione tra la U introdotta sopra e la funzione generatrice classica F, a meno

di correzioni di ordine \hbar (che pero' Dirac non discute in maniera esplicita). Si vuole usare questa impostazione per ricavare un operatore di evoluzione nel tempo sfruttando la teoria di Hamilton-Jacobi. Presi due istanti t'' e t' si interpreta $\vec{q} = \vec{q}_{t''} := q''$ e $\vec{Q} = \vec{q}_{t'} := q'$, mentre come funzione generatrice si prende l'azione classica. Allora esiste una trasformazione di contatto

$$(q''|q') = \langle q_{t''}|q_{t'}\rangle = \langle q'', t''|q', t'\rangle \tag{2.24}$$

che connette le rappresentazioni diagonali rispettivamente in $\hat{q}_{t''}$ e in $\hat{q}_{t'}$. Si potrebbe supporre, come fa anche Dirac, che in virtù di quanto esposto sopra questa trasformazione abbia la forma

$$(q''|q') \longrightarrow e^{\frac{i}{\hbar} \int_{t'}^{t''} L dt}$$
 (2.25)

e per scarti temporali infinitesimali

$$\langle q_{t'+dt}|q_{t'}\rangle \longrightarrow e^{\frac{i}{\hbar}Ldt}$$
 (2.26)

In realtà tale congettura non è del tutto vera: l'azione classica andrebbe sostituita da un'azione efficace, oggi conosciuta come Γ , che tenga conto delle correzioni di ordine \hbar . Questi termini aggiuntivi diventano trascurabili nel limite $dt \to 0$, rendendo la (2.26) vera. Gli ultimi due risultati hanno comunque il pregio di collegare due "very fundamental things" [3] della meccanica quantistica al loro analogo classico, tra l'altro espresso in termini semplici di un altro oggetto fondamentale. La seconda relazione suggerisce inoltre di considerare l'azione come funzione delle coordinate nel tempo, piuttosto che delle velocità.

Investighiamo meglio la (2.25) in virtù della sua importanza e della vaghezza con cui è stata enunciata in [3]. Dunque, si divida l'intervallo t'' - t' in m passi. Per la trasformata di contatto vale

$$(q''|q') = \int (q''|q_m) dq_m (q_m|q_{m-1}) dq_{m-1}...dq_1 (q_1|q')$$
(2.27)

mentre la struttura a gruppi dello spazio classico richiede

$$e^{\frac{i}{\hbar} \int_{t'}^{t''} L dt} = e^{\frac{i}{\hbar} \int_{t_m}^{t''} L dt} e^{\frac{i}{\hbar} \int_{t_{m-1}}^{t_m} L dt} \dots e^{\frac{i}{\hbar} \int_{t'}^{t_1} L dt}$$
(2.28)

L'ultima equazione eguaglia una funzione dei soli istanti t'' e t' a un prodotto di funzioni che sembra dipendere anche da tutti gli istanti intermedi $t_1, t_2...t_{m-1}, t_m$. Perchè l'uguaglianza supposta da Dirac tenga, il lato destro deve essere ricondotto ad una funzione dei soli estremi temporali. Va cioè interpretato sostituendo ad ognuno dei $q_1, q_2...q_m$ il loro valore risultante dal principio di minima azione. Questo processo di sostituizione è l'equivalente dell'integrazione su tutti i $q_1, q_2...q_m$ che si trova in (2.27), ottenendo quindi come risultato finale la (2.25) o (2.28). Come anticipato, questo è incorretto, e costituisce il punto cruciale dell'analisi di Feynman, che esplicita in maniera consistente le integrazioni intermedie.

2.3 L'ampiezza di probabilità

Ora si considera il limite per $m \to \infty$ della (2.27), supposto che esista. Per semplicità si pensa agli m passi come equispaziati: $t_k = t' + k\epsilon$, $t' = t_0$ e $t'' = t_N$

$$\langle q_{t''}|q_{t'}\rangle = (q''|q') = \lim_{\epsilon \to 0} \int dq_1 dq_2 ... dq_{N-1} (q''|q_{N-1}) ... (q_1|q')$$
 (2.29)

A questo punto si procede nei calcoli sostituendo alla notazione di Dirac [3] [2] quella di Feynman [4]. La trasformazione di contatto (q''|q') prende il nome di nucleo di Feynman e viene ora indicato con K(x'', x'; t'', t'). L'equazione precedente si traduce in

$$K(x'', x'; t'', t') = \lim_{\epsilon \to 0} \sum_{k=1}^{N-1} \int dx_k \prod_{j=0}^{N-1} K(x_{j+1}, x_j; t_j + \epsilon, t_j)$$
 (2.30)

Per ognuno degli N nuclei valutati su un tempo infinitesimale la relazione

$$K(x_{j+1}, x_j; t_j + \epsilon, t_j) = \frac{1}{A} \exp\left[\frac{i}{\hbar} \epsilon L\left(x_{j+1}, \frac{x_{j+1} - x_j}{\epsilon}\right)\right] , \qquad (2.31)$$

con A fattore di normalizzazione, chiarisce la vaga corrispondenza espressa in (2.26) dando a " \longrightarrow " il significato di "è proporzionale a". Inserendo nella (2.30) si ottiene

$$K(x_{j+1}, x_j; t_{j+1}, t_j) = \lim_{\epsilon \to 0} A^{-N} \prod_{k=1}^{N-1} \int dx_k \exp\left[\frac{i}{\hbar} \sum_{j=0}^{N-1} \epsilon L\left(x_{j+1}, \frac{x_{j+1} - x_j}{\epsilon}\right)\right]$$
(2.32)

All'esponente, nel limite $\epsilon \to 0$, si riconosce l'azione classica S. Si scrive

$$K(x'', x'; t'', t') = \int_{x(t')=x'}^{x(t'')=x''} \mathcal{D}x(t) \exp\left(\frac{i}{\hbar}S[x(t)]\right)$$
 (2.33)

dove $\int_{x'}^{x''} \mathcal{D}x(t)$ indica una sorta di integrazione sullo spazio delle funzioni x(t), i.e. su tutti i possibili cammini che connettono x' e x'', definita dalla (2.32). Tale integrale può essere pensato in stretta analogia con un integrale di Riemann: fissati i due punti estremi, si considera un sottoinsieme dei possibili cammini dividendo l'intervallo temporale in sezioni di larghezza ϵ e prendendo per ogni t_k uno specifico x_k . Si costruisce una traiettoria collegando i punti scelti con linee rette³. A questo punto sommare su tutti i cammini significa eseguire integrali multipli su tutti i valori degli x_k tra k=1 e k=N-1. Con la diminuzione di ϵ si ottiene un campione più rappresentativo, ma, come per l'integrale di Riemann, il limite $\epsilon \to 0$ non esiste a meno della definizione di

³O ancora meglio con sezioni dell'orbita classica

un fattore di normalizzazione $A(\epsilon)^4$.

Il nucleo (2.33) si chiama integrale di Feynman sui cammini ed è definito nella (2.32) in maniera reticolare, passando per suddivisione e limite. Tale formulazione evita i numerosi problemi legati a una definizione matematicamente rigorosa dell'integrazione nello spazio dei funzionali. La $\mathcal{D}x(t)$ sta ad indicare una qualche sorta di misura sullo spazio delle funzioni x(t). Ci si imbatte subito in difficoltà: prima di tutto si parla di una quantità complessa, che non può essere costituita solo dal fattore di normalizzazione, non definito nel limite $\epsilon \to 0$. In campo matematico un oggetto del genere è un integrale funzionale. Wiener ha pubblicato diversi lavori su questo argomento, definendo una speciale misura condizionale per lo spazio delle funzioni continue non derivabili⁵. Continuando analiticamente l'integrale dei cammini nel tempo puramente immaginario (rotazione di Wick⁶) $t \to -it$ si ottiene l'integrale dei cammini euclideo, esprimibile in termini della sopracitata misura di Wiener:

$$K_{E}(x'', x'; T) := K(x'', x'; -iT)$$

$$= \int \mathcal{D}x(t)e^{-\frac{1}{\hbar}S_{E}} = \int \mathcal{D}W[x]e^{-\frac{1}{\hbar}\int_{t'}^{t''}V(x)dt}$$
(2.34)

con S_E azione euclidea, definita in coordinate cartesiane da

$$S_E = \int_{t'}^{t''} \left(\frac{m}{2} \dot{x}^2 + V(x) \right) dt \tag{2.35}$$

L'integrale sui cammini euclideo è cioè interpretabile come il valore di aspettazione del funzionale reale $\exp\left[-\frac{1}{\hbar}\int_{t'}^{t''}V(x(t))dt\right]$ sulle traiettorie di una particella browniana⁷. Nel tempo euclideo, quindi, l'integrale di Feynman è un integrale funzionale ben definito dalla formula (2.34), conosciuta come di Feynman-Kac. Riprendiamo la (2.24).

$$(q''|q') = \langle q_{t''}|q_{t'}\rangle = \langle q'', t''|q', t'\rangle = \langle q''|e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}t''}e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t'}|q'\rangle = \langle q''|e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}(t''-t')}|q'\rangle = K(x'', x'; t'', t')$$
(2.36)

⁴In alcune situazioni l'integrazione alla Riemann può non essere adeguata. In ogni caso "the concept of the sum over paths, like the concept of an ordinary integral, is indipendent of a special definition and valid in spite of the failure of such definition" [5].

⁵La ragione per cui ci si concentra su questo spazio è spiegata dal notare che le velocità $(x_{j+1}-x_j)^2/\epsilon$ che danno un contributo apprezzabile sono quelle alte, di ordine $\hbar/m\epsilon$, che però divergono per $\epsilon \to 0$

 $^{^6\}mathrm{La}$ stessa continuazione analitica $t\to -it$ trasforma l'equazione di Schrödinger nell'equazione del calore

 $^{^7}$ L'osservazione che l'integrale di cammino euclideo possa essere interpretato come descrittivo del moto di una particella in un potenziale invertito -V è alla base dell'approssimazione a istantoni. Questo metodo fornisce nel limite semiclassico $\hbar \to 0$ il contributo dell'ampiezza di probabilità per il fenomeno di trasmissione attraverso una barriera di potenziale, che non emerge ad alcun ordine perturbativo in \hbar .

Il nucleo di Feynman coincide con il nucleo dell'operatore di evoluzione temporale nella formulazione di Dirac della meccanica quantistica: K(x'', x'; t'', t') non è altro che l'ampiezza di probabilità della transizione $(x'', t'') \leftarrow (x', t')$. Tale probabilità tiene conto di tutti i possibili cammini esplorabili dalla particella per andare dal punto fissato $a = (x_a, t_a)$ al punto fissato $b = (x_b, t_b)$; ognuna di queste traiettorie contribuisce con la medesima ampiezza e con una fase data dall'azione in unità di \hbar associata a tale opzione, come è scritto nella (2.33).

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

$$K(a,b) = \sum_{sui \ cammini} \phi[x(t)]$$
(2.37)

In effetti anche la regola di composizione per eventi successivi ricalca quella nota per le probabilità. Supposto che tra a e b si possa trovare un terzo evento, intermedio in ordine temporale, c, l'azione per un qualsiasi cammino totale è additiva⁸

$$S[b, a] = S[c, a] + S[b, c]$$
(2.38)

il che si traduce intuitivamente in una dipendenza di tipo moltiplicativo per il nucleo. Infatti,

$$K(b,a) = \int_a^b e^{\frac{i}{\hbar}S[b,c] + \frac{i}{\hbar}S[c,a]} \mathcal{D}x(t)$$
 (2.39)

può essere valutato integrando prima su tutti i cammini tra a e c (quindi considerando S[c,b] constante), solo in seguito su quelli a-c e infine su ogni possibile valore di c.

$$K(b,a) = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{c}^{b} e^{\frac{i}{\hbar}S[c,b]} K(c,a) \mathcal{D}x(t) dx_{c} = \int_{-\infty}^{\infty} K(b,c) K(c,a) dx_{c}$$
 (2.40)

Nella formulazione canonica della meccanica quantistica si trova un oggetto del tutto simile. La funzione d'onda $\Psi(x,t)$ ha il significato fisico dell'ampiezza di probabilità associata ad un determinato stato, ma con il dettaglio, vantaggioso in alcune situazioni, di non tenere conto del suo moto precedente a t. Il nucleo K(b,a), cioè, è la funzione d'onda $\Psi(b)$ nel caso particolare in cui il sistema venga da a. Si parla di ampiezze di probabilità, quindi vale la legge di composizione (2.40)

$$\Psi(b) = \int_{-\infty}^{\infty} K(b, c)\Psi(c)dx_c \tag{2.41}$$

che appunto considera l'ampiezza di probabilità che la particella arrivi in b come la somma su tutti i possibili eventi intermedi c al tempo fissato t_c del prodotto tra l'ampiezza per il tragitto c - b e quella per l'evento c^9 .

⁸Poichè la lagrangiana dipende solo da coordinate e derivate prime delle stesse, vista l'evidenza sperimentale che queste bastano per descrivere ogni stato di un qualsiasi sistema

⁹Un altro modo di definire $K(\vec{x}'', \vec{x}'; t'', t')$ è come funzione di Green dell'equazione di Schrödinger. Con questo approccio la relazione con la funzione d'onda è data direttamente dalla (2.40). Questa

2.4 L'equazione di Schrödinger

La validità per qualsiasi istante della (2.38) permette di definire un'equazione differenziale prendendo scarti temporali infinitesimali. Ovviamente siamo interessati a un'equazione differenziale ben precisa: quella di Schrödinger.

Presi come istante iniziale t e come finale l'infinitesimamente distante $t+\epsilon$, corrispondenti ai punti y e x

$$\Psi(x,t+\epsilon) = \int_{-\infty}^{\infty} K(x,y;t+\epsilon,t)\Psi(y,t)dy$$

$$= \frac{1}{A} \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left[\frac{i}{\hbar}\epsilon L\left(\frac{x-y}{\epsilon},\frac{x+y}{2}\right)\right]\Psi(y,t)dy$$
(2.42)

per un sistema unidimensionale soggetto al potenziale V(t)

$$\Psi(x,t+\epsilon) = \frac{1}{A} \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left[\frac{i}{\hbar} \frac{m}{2\epsilon} (x-y)^2 - \frac{i}{\hbar} \epsilon V\left(\frac{x+y}{2},t\right)\right] \Psi(y,t) dy$$
 (2.43)

Se y è significativamente diverso da x, $(x-y)^2/\epsilon$ è una quantità molto grande e l'esponenziale di cui è fase oscilla molto rapidamente con y. Vista la regolarità delle altre funzioni coinvolte, l'integrale avrà valori molto bassi. La probabilità di transizione, cioè, è apprezzabile solo per x e y molto vicini, da cui la sostituzione $y = x + \eta$

$$\Psi(x, t + \epsilon) = \frac{1}{A} \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left[\frac{im\eta^2}{2\hbar\epsilon}\right] \times \exp\left[-\frac{i}{\hbar}\epsilon V\left(x + \frac{\eta}{2}, t\right)\right] \Psi(x + \eta, t) d\eta$$
(2.44)

La fase del primo esponenziale varia tra 0 e 1 per η compreso tra 0 e $\sqrt{2\hbar\epsilon/m}$. Si procede ad espandere Ψ in serie di potenze, limitandoci ai termini di ordine ϵ ; si tengono quelli al secondo ordine in η e il termine $\epsilon V(x+\frac{\eta}{2},t)$ può essere sostituito da $\epsilon V(x,t)$.

$$\begin{split} \Psi(x,t) + \epsilon \frac{\partial \Psi}{\partial t} &= \frac{1}{A} \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left[\frac{im\eta^2}{2\hbar\epsilon}\right] \\ &\times \left[1 - \frac{i}{\hbar} \epsilon V(x,t)\right] \left[\Psi(x,t) + \eta \frac{\partial \Psi}{\partial x} + \frac{\eta^2}{2} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2}\right] d\eta \end{split} \tag{2.45}$$

Per assicurare l'esistenza del limite $\epsilon \to 0$ nell'integrale di cammino, l'equazione sopra deve essere valida all'ordine 0 di ϵ :

$$\Psi(x,t) = \frac{1}{A} \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left[\frac{im\eta^2}{2\hbar\epsilon}\right] d\eta \quad \Psi(x,t) = \frac{1}{A} \left(\frac{2\pi i\hbar\epsilon}{m}\right)^{\frac{1}{2}} \Psi(x,t)$$
 (2.46)

equazione interpreta K come nucleo integrale, identico a quello dell'operatore di evoluzione temporale (2.36), completando i risultati qui ottenuti.

Abbiamo un modo per valutare il fattore di normalizzazione

$$A = \left(\frac{2\pi\hbar i\epsilon}{m}\right)^{\frac{1}{2}} \tag{2.47}$$

Quindi

$$\Psi(x,t) + \epsilon \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \left(\frac{2\pi i\hbar\epsilon}{m}\right)^{\frac{1}{2}} \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left(\frac{im\eta^2}{2\hbar\epsilon}\right) \times \left[\Psi(x,t) + \eta \frac{\partial \Psi}{\partial x} + \frac{\eta^2}{2} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2}\right] - \frac{i}{\hbar}\epsilon \times \left[V(x,t)\Psi(x,t) + \eta V(x,t) \frac{\partial \Psi}{\partial x} + \frac{\eta}{2} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2}\right] d\eta$$
(2.48)

Tenendo conto che

$$\int_{-\infty}^{\infty} \eta \exp\left[\frac{im\eta^2}{2\hbar\epsilon}\right] d\eta = 0 \tag{2.49}$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} \eta^2 \exp\left[\frac{im\eta^2}{2\hbar\epsilon}\right] d\eta = \frac{i\hbar\epsilon}{m}$$
 (2.50)

dall'equazione sopra rimane

$$\Psi + \epsilon \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \Psi - \frac{i}{\hbar} \epsilon V \Psi + \frac{i\hbar \epsilon}{2m} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial r^2}$$
 (2.51)

Perchè tale equazione sia vera all'ordine ϵ , $\Psi(x,t)$ deve evidentemente soddisfare

$$\frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{i}{\hbar} \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + V(x, t) \Psi \right]$$
 (2.52)

ovvero l'equazione di Schrödinger per il sistema unidimensionale con potenziale V(x). Aver ritrovato l'equazione fondamentale della meccanica ondulatoria significa che la funzione d'onda (2.41) a cui siamo giunti tramite il nucleo di Feynman è del tutto equivalente a quella definita canonicamente. Un sistema, cioè, è ugualmente ben descritto dallo specificare il suo nucleo K o la sua hamiltoniana \hat{H} ; in altre parole i calcoli sopra dimostrano che formulazione qui presentata è una valida descrizione della meccanica quantistica, equivalente a quella matriciale e alla meccanica ondulatoria.

Si è detto che anche K(b,a) è una funzione d'onda, la $\Psi(b)$ nel caso particolare di una particella che parta da a. Quindi anche K deve soddisfare un'equazione di Schrödinger, e precisamente la

$$\frac{\partial K(b,a)}{\partial t_b} = -\frac{i}{\hbar} \hat{H}_b K(b,a) = -\frac{i}{\hbar} \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x_b^2} K(b,a) + V(b) K(b,a) \right]$$
(2.53)

Questa vale sia per $t_b > t_a$, che per $t_b < t_a$ (anche se in maniera triviale, visto che in tal caso si definisce K(b,a) = 0), ma non per $t_b = t_a$ perchè lì K è discontinua¹⁰.

2.5 Teoria Perturbativa

L'integrale sui cammini costituisce uno strumento efficace per la modellizzazione della teoria quantistica (soprattutto oltre la meccanica), ma come l'equazione di Schrödinger è risolvibile esattamente solo per un numero limitato di sistemi. In generale gli integrandi per cui la (2.33) ha facile soluzione sono quelli quadratici, per cui ci si può ricondurre a un integrale gaussiano. Molti potenziali rilevanti non sono però di questo tipo e ci si deve accontentare di una soluzione approssimata. Un metodo spesso utile è quello fornito dalla teoria perturbativa, applicabile per potenziali relativamente deboli.

Concentriamoci su una particella sottoposta a un potenziale unidimensionale V(x,t), il cui nucleo indichiamo con K_V

$$K_V(b,a) = \int_a^b \exp\left[-\frac{i}{\hbar} \int_{t_a}^{t_b} \left(\frac{m}{2}\dot{x}^2 - V(x,t)\right) dt\right] \mathcal{D}(x(t))$$
 (2.54)

Se l'integrale nel tempo del potenziale è piccolo rispetto a \hbar allora vale l'espansione in serie

$$\exp\left[-\frac{i}{\hbar} \int_{t_a}^{t_b} V(x,t)dt\right] = 1 - \frac{i}{\hbar} \int_{t_a}^{t_b} V(x,t)dt + \frac{1}{2} \left(-\frac{i}{\hbar} \int_{t_a}^{t_b} V(x,t)dt\right)^2 + \dots \quad (2.55)$$

Sostituendo nella (2.54)

$$K_V(b,a) = K_0(b,a) + K^{(1)}(b,a) + K^{(2)}(b,a) + \dots$$
 (2.56)

dove si è chiamato

$$K_{0}(b,a) = \int_{a}^{b} \exp\left[\frac{i}{\hbar} \int_{t_{a}}^{t_{b}} \frac{m}{2} \dot{x}^{2} dt\right] \mathcal{D}x(t)$$

$$K^{(1)}(a,b) = -\frac{i}{\hbar} \int_{a}^{b} \exp\left[\frac{i}{\hbar} \int_{t_{a}}^{t_{b}} \frac{m}{2} \dot{x}^{2} dt\right] \int_{t_{a}}^{t_{b}} V(x(s),s) ds \mathcal{D}x(t)$$

$$K^{(1)}(a,b) = -\frac{1}{2\hbar^{2}} \int_{a}^{b} \exp\left[\frac{i}{\hbar} \int_{t_{a}}^{t_{b}} \frac{m}{2} \dot{x}^{2} dt\right] \int_{t_{a}}^{t_{b}} V(x(s),s) ds \int_{t_{a}}^{t_{b}} V(x(s'),s') ds' \mathcal{D}x(t)$$
(2.57)

$$\frac{\partial K(b,a)}{\partial t_b} = -\frac{i}{\hbar}\hat{H}_bK(b,a) + \delta(x_b - x_a)\delta(t_b - t_a)$$

il che chiarisce la possibilità di definire K come funzione di Green per l'equazione di Schrödinger

 $[\]overline{\ }^{10}$ In effetti $K(b,a) \to \delta(x_b - x_a)$ per $t_b \to t_a$. Quindi K(b,a) soddisfa

Appare evidente che $K_0(b, a)$ è il nucleo per la particella libera tra $a \in b$. Per valutare gli altri due termini, invece, si deve notare che

$$\int_{a}^{b} \exp\left[\int_{t_{a}}^{t_{b}} \frac{m}{2} \dot{x}^{2} dt\right] V(x(s), s) \mathcal{D}x(t)$$
(2.58)

è la somma delle ampiezze per la particella libera, ma pesate dal potenziale V(x(t),t) valutato al solo tempo t=s. Non contano altre caratteristiche del potenziale lungo la traiettoria x(t); in altre parole prima e dopo l'istante t=s la particella si comporta come se fosse libera. Dividiamo il moto in riferimento a questo punto particolare, in cui la particella viene diffusa: sia $s=:t_c$ e si supponga che a tal istante ogni cammino passi per x_c . Allora per la (2.40) la somma lungo tutto il cammino ha la forma $K_0(b,c)K_0(c,a)$, che nella (2.58) rende

$$\int_{a}^{b} \exp\left[\int_{t_{a}}^{t_{b}} \frac{m}{2} \dot{x}^{2} dt\right] V(x(t_{c}), t_{c}) \mathcal{D}x(t) = \int_{-\infty}^{\infty} K_{0}(b, c) V(c) K_{0}(c, a) dx_{c}$$
 (2.59)

Generalmente gli estremi di integrazione $-\infty$ e ∞ che rappresentano tutti i possibili valori di x_c sono limitati dalla regione considerata o dal potenziale, che spesso va a 0 per x sufficientemente grande. Tornando all'espressione di $K^{(1)}$ nella (2.57), si può ora scambiare l'ordine di integrazione

$$K^{(1)}(b,a) = -\frac{i}{\hbar} \int_{t_a}^{t_b} \int_{-\infty}^{\infty} K_0(b,c) V(c) K_0(c,a) dx_c dt_c$$
 (2.60)

L'integrale sui cammini è stato sostituito da un'integrazione classica, di più semplice trattazione, che tratta $-\frac{i}{\hbar}V$ come l'ampiezza di diffusione per unità di volume e di tempo. Allo stesso modo $K^{(2)}(b,a)$ è interpretato come l'ampiezza di probabilità che tra a e b la particella venga diffusa due volte, in d e poi in c:

$$K^{(2)}(b,a) = \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^2 \iiint K_0(b,c)V(c)K_0(c,d)V(d)K_0(d,a)dx_cdt_cdx_ddt_d$$
 (2.61)

Il fattore $\frac{1}{2}$ che appare nella (2.57) è inglobato nel dominio di integrazione per t_c , che deve giacere tra t_d e t_b . Il nucleo del problema è costituito da una somma su alternative (nessuna diffusione, una sola diffusione, due diffusioni,...n diffusioni) in cui ciascun termine è costituito a sua volta da una somma su alternative (sul luogo e il tempo della diffusione). La (2.56) può ora essere riscritta sostituendo le espressioni ricavate per i

termini della serie

$$K_{V}(b,a) = K_{0}(b,a) - \frac{i}{\hbar} \int \int K_{0}(b,c)V(c)K_{0}(c,a)dx_{c}dt_{c} + \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^{2} \iiint K_{0}(b,c)V(c)K_{0}(c,d)V(d)K_{0}(d,a)dx_{c}dt_{c}dx_{d}dt_{d} + \dots$$

$$= K_{0}(b,a) - \frac{i}{\hbar} \int \int K_{0}(b,c)V(c)$$

$$\times \left[K_{0}(c,a) - \frac{i}{\hbar} \iint K_{0}(c,d)V(d)K_{0}(d,a)dx_{c}dt_{c}dx_{d}dt_{d} + \dots\right] dx_{c}dt_{c}$$
(2.62)

il che restituisce un'espressione esatta per il nucleo perturbato:

$$K_V(b,a) = K_0(b,a) - \frac{i}{\hbar} \int \int K_0(b,c)V(c)K_V(c,a)dx_cdt_c$$
 (2.63)

Questa maniera di scrivere il nucleo va interpretata come la somma tra due alternative: la particella non sarà mai diffusa lungo il suo percorso oppure lo sarà almeno una volta. L'ultima delle eventuali deviazioni ha luogo in c, l'integrazione su tutti i possibili dx_c e t_c esaurisce le opzioni.

La teoria sopra esposta è applicabile anche per perturbazioni di sistemi diversi dalla particella libera. L'unica modifica da apportare consiste nel sostituire al nucleo per la particella libera quello del sistema imperturbato in ogni occorrenza.

2.6 Limite Classico

La formulazione con gli integrali di cammino offre un modo semplice per ritrovare la meccanica newtoniana. Nel limite classico $\hbar \to 0$ la fase $\frac{i}{\hbar}S[x(t)]$ varia molto velocemente con x. Piccoli spostamenti in x provocano grosse variazioni nell'angolo della fase, per cui sarà equivalentemente probabile che il loro contributo sia positivo oppure negativo, portando a un saldo totale nullo. Quindi per contribuire in maniera sostanziale all'integrale (2.33), un cammino $\bar{x}(t)$ deve essere quello nel cui intorno la fase varii il più lentamente possibile, in modo che i contributi si sommino quasi in fase. Tale $\bar{x}(t)$ è quindi quello che rende stazionaria l'azione ed è unico (principio di Hamilton). In realtà, come si è visto, anche i cammini in prossimità di $\bar{x}(t)$ contribuiscono, ma siccome le variazioni di x sono abbastanza piccole da mantenere ΔS entro \hbar , esse non sono apprezzabili nel dominio classico. Anche la (2.40) ha un'immediata interpretazione classica. È il principio di Huygens per onde di materia: nota l'ampiezza dell'onda Ψ sulla superficie x(t), l'ampiezza in un punto vicino in $t + \epsilon$ è la somma dei contributi di ciascun punto sulla superficie in t, ognuno ritardato in maniera proporzionale all'azione presa lungo il cammino tra i due punti che la minimizza (per l'equivalente del principio di minimo tempo di Fermat).

Capitolo 3

Esempi basilari

3.1 Particella libera

Consideriamo una particella libera nello spazio euclideo D-dimensionale. La sua lagrangiana è

$$L = \frac{m}{2}\dot{\vec{x}}^2\tag{3.1}$$

Dalle definizioni (2.32), (2.33) e (2.47)

$$K_{0}(\vec{x}'', \vec{x}'; T) = \int_{\vec{x}' = \vec{x}(t)}^{\vec{x}'' = \vec{x}(t)} \exp\left[\frac{i}{\hbar} \int_{t'}^{t''} \frac{m}{2} \dot{\vec{x}}^{2} dt\right]$$

$$= \lim_{N \to \infty} \left(\frac{m}{2\pi i \epsilon \hbar}\right)^{\frac{N}{2}D} \prod_{k=1}^{N-1} \int_{\mathbf{R}^{D}} d\vec{x}_{k} \exp\left[\frac{im}{2\epsilon \hbar} \sum_{j=1}^{N} (\vec{x}_{j} - \vec{x}_{j-1})^{2}\right]$$
(3.2)

Ognuno degli integrali del prodotto è di tipo gaussiano, quindi si può procedere una variabile per volta:

$$\left(\frac{m}{2\pi i\epsilon\hbar}\right)^{D} \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left[\frac{im}{2\hbar\epsilon} \left[(\vec{x}_{2} - \vec{x}_{1})^{2} + (\vec{x}_{1} - \vec{x}_{0})^{2} \right] \right] d\vec{x}_{1}$$

$$= \left(\frac{m}{2\pi i\hbar 2\epsilon}\right)^{\frac{D}{2}} \exp\left[\frac{im}{2\hbar 2\epsilon} (\vec{x}_{2} - \vec{x}_{0})^{2}\right] \tag{3.3}$$

Poi si moltiplica per

$$\left(\frac{m}{2\pi i\hbar\epsilon}\right)^{\frac{D}{2}} \exp\left[\frac{im}{2\hbar\epsilon}(\vec{x}_3 - \vec{x}_2)^2\right]$$
(3.4)

e si integra su $d\vec{x}_3$, ottenendo

$$\left(\frac{m}{2\pi i\hbar 3\epsilon}\right)^{\frac{D}{2}} \exp\left[\frac{im}{2\hbar 3\epsilon}(\vec{x}_3 - \vec{x}_0)^2\right]$$
(3.5)

Iterando per tutti gli \vec{x}_k

$$\left(\frac{m}{2\pi i\hbar N\epsilon}\right)^{\frac{D}{2}} \exp\left[\frac{im}{2\hbar N\epsilon}(\vec{x}_N - \vec{x}_0)^2\right]$$
(3.6)

Quindi il risultato è

$$K_0(\vec{x}'', \vec{x}'; T) = \left(\frac{m}{2\pi i\hbar T}\right)^{\frac{D}{2}} \exp\left[\frac{im}{2\hbar T}(\vec{x}'' - \vec{x}')^2\right]$$
(3.7)

Ed è immediato verificare che questo nucleo risolve l'equazione di Schrödinger

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial T} K_0(\vec{x}'', \vec{x}'; T) = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_{x''}^2 K_0(\vec{x}'', \vec{x}'; T) .$$
 (3.8)

Infatti, esplicitando le derivate parziali per ogni x_i si ha

$$i\hbar \left(\frac{m}{2\pi\hbar i}\right)^{\frac{1}{2}} \left[-\frac{1}{2}T^{-\frac{3}{2}} \exp\left(\frac{im}{2\hbar T}(x_i'' - x_i')^2\right) - T^{-\frac{1}{2}} \frac{im}{2\hbar}(x_i'' - x_i')^2 T^{-2} \exp\left(\frac{im}{2\hbar T}(x_i'' - x_i')^2\right) \right]$$

$$= -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{m}{2\pi\hbar iT}\right)^{\frac{1}{2}} \frac{im}{2\hbar T} 2 \left[\exp\left(\frac{im}{2\hbar T}(x_i'' - x_i')^2\right) + \frac{im}{2\hbar T} 2(x_i'' - x_i')^2 \exp\left(\frac{im}{2\hbar T}(x_i'' - x_i')^2\right) \right]$$
(3.9)

e semplificando

$$T^{-\frac{3}{2}} \exp\left(\frac{im}{2\hbar T}(x_i'' - x_i')^2\right) \left[1 + T^{-1}\frac{im}{\hbar}(x_i'' - x_i')^2\right]$$

$$= T^{-\frac{1}{2}}T^{-1} \exp\left(\frac{im}{2\hbar T}(x_i'' - x_i')^2\right) \left[1 + \frac{im}{T\hbar}(x_i'' - x_i')^2\right]$$
(3.10)

Possiamo inoltre esprimere la soluzione trovata in termini del vettore d'onda $\vec{k}=\vec{p}/\hbar$ attraverso una trasformata di Fourier

$$K_0 = \frac{1}{(2\pi)^D} \int_{\mathbf{R}^D} d\vec{k} \exp\left[i\vec{k}(\vec{x}'' - \vec{x}') - \frac{i}{\hbar} T\left(\frac{\hbar^2 \vec{k}^2}{2m}\right)\right]$$
(3.11)

da cui si riconoscono le funzione d'onda normalizzate della particella libera

$$\Psi_{\vec{k}}(\vec{x}) = \frac{1}{(2\pi)^{\frac{D}{2}}} e^{i\vec{k}\vec{x}} \tag{3.12}$$

con relativo spettro energetico

$$E_{\vec{k}} = \frac{\hbar^2 \vec{k}^2}{2m} \ . \tag{3.13}$$

3.2 Oscillatore armonico

L'oscillatore armonico è un sistema di fondamentale importanza in fisica, perchè consente di modellizzare numerose situazioni reali. La lagrangiana che lo descrive nel caso unidimensionale è

$$L(x, \dot{x}) = \frac{m}{2}\dot{x}^2 - \frac{m\omega^2}{2}x^2$$
 (3.14)

Invece che utilizzare la definizione a reticolo, sviluppiamo un metodo alternativo, valido in generale per gli integrali gaussiani.

Sia $\bar{x}(t)$ il cammino classico tra x' e x''. Si esprime un qualsiasi x(t) come deviazione da questo

$$x(t) = \bar{x}(t) + y(t) \tag{3.15}$$

Si può sostituire la variabile del problema con y, visto che ad ogni istante essa differisce da x solo per una costante. Quindi $dx_i = dy_i$ per ogni istante t_i , ovvero $\mathcal{D}x(t) = \mathcal{D}y(t)$. Nell'azione i termini non dipendenti da y, se raccolti, restituiscono l'azione classica $S[\bar{x}(t)] = S_{cl}$, mentre quelli lineari in y danno risultato nullo¹.

$$S[x(t)] = S[\bar{x}(t) + y(t)] = \int_{t'}^{t''} \left[\frac{m}{2} (\bar{x}^2 + 2\bar{x}y + y^2) - \frac{m\omega^2}{2} (\dot{\bar{x}}^2 + 2\dot{\bar{x}}\dot{y} + \dot{y}^2) \right] dt \quad (3.16)$$

La nuova variabile y deve annullarsi agli istanti t' e t'', visto che è una variazione su un cammino di estremi fissi. Alla luce di queste considerazioni il nucleo si scrive

$$K(x'', x'; T) = \exp\left[\frac{i}{\hbar} S_{cl}[x', x'']\right] \int_0^0 \exp\left[\frac{i}{\hbar} \int_{t'}^{t''} \left(\frac{m}{2} y^2 - \frac{m\omega^2}{2} \dot{y}^2\right) dt\right] \mathcal{D}y(t) \quad (3.17)$$

Siccome y(t) è 0 agli estremi, l'integrale potrà dipendere solo da t' e t''. Quindi

$$K(x'', x'; T) = \exp\left[\frac{i}{\hbar}S_{cl}\right] F(t'', t')$$

$$= \exp\left[\frac{im\omega}{2\hbar\sin\omega T} [(x''^2 + x'^2)\cos\omega T - 2x''x']\right] F(T)$$
(3.18)

y(t) è una traiettoria ciclica, quindi può essere espressa come serie di Fourier di seni

$$y(t) = \sum_{n=1}^{\infty} a_n \sin \frac{n\pi t}{T}$$
 (3.19)

Un cammino è descritto dagli a_n piuttosto che dal valore di y a t specifici. Lo jacobiano della trasformazione può non essere valutato esplicitamente, dal momento che F(T) per

 $^{^{1}}$ Il cammino classico è determinato proprio da questa proprietà: nessun effetto in S per variazioni al primo ordine

la particella libera, noto dalla sezione precedente, sarà usato come caso particolare $\omega=0$ per correggere il fattore moltiplicativo totale. Con questo cambio di variabile, la parte cinetica dell'integrale di azione diventa

$$\frac{m}{2} \int_0^T \dot{y}^2 dt = \frac{m}{2} \sum_{n=1}^\infty \sum_{m=1}^\infty \frac{n\pi}{T} \frac{m\pi}{T} a_n a_m \int_0^T \left(\cos\frac{n\pi t}{T}\right) \cos\left(\frac{m\pi t}{T}\right) dt
= \frac{m}{2} \frac{T}{2} \sum_{n=1}^\infty \left(\frac{n\pi}{T}\right)^2 a_n^2$$
(3.20)

e la parte potenziale

$$\frac{m\omega^2}{2} \int_0^T y^2 dt = \frac{m\omega^2}{2} \frac{T}{2} \sum_{n=1}^\infty a_n^2$$
 (3.21)

F(T) ha espressione

$$F(T) = \int_0^0 \exp\left(\frac{i}{\hbar} \int_0^T \frac{m}{2} (\dot{y}^2 - \omega^2 y^2) dt\right) \mathcal{D}y(t)$$

$$= (A)^{-N} J \prod_{k=1}^N \int_{-\infty}^\infty da_k \exp\left[\frac{im}{2\hbar} \frac{T}{2} \sum_{n=1}^N \left[\left(\frac{n\pi}{T}\right)^2 - \omega^2\right] a_n^2\right]$$
(3.22)

Come nella sezione precedente si può procedere un coefficiente per volta

$$\int_{-\infty}^{\infty} da_n \frac{1}{A} \exp\left[\frac{im}{2\hbar} \frac{T}{2} \left[\left(\frac{n\pi}{T}\right)^2 - \omega^2 \right] a_n^2 \right] = \left(\frac{2}{\epsilon T}\right)^{\frac{1}{2}} \left(\frac{n^2 \pi^2}{T^2} - \omega^2\right)^{-\frac{1}{2}}$$
(3.23)

 $(2/\epsilon T)^{\frac{1}{2}}$ e $(n^2\pi^2/T^2)^{-\frac{1}{2}}$ non dipendono da ω , quindi vanno inglobati nella costante moltiplicativa. Rimane un unico termine, che va preso nel limite $N\to\infty$

$$\lim_{N \to \infty} \prod_{n=1}^{N} \left(1 - \frac{\omega^2 T^2}{n^2 \pi^2} \right)^{-\frac{1}{2}} = \left[\frac{\sin \omega T}{\omega T} \right]^{-\frac{1}{2}}$$
 (3.24)

Manca solo il tanto citato fattore moltiplicativo. Si interpreta la particella libera come un oscillatore armonico a $\omega = 0$. Nella sezione precedente si è trovato, anche se con un altro metodo

$$F_0(T) = \left(\frac{m}{2\pi i\hbar T}\right)^{\frac{1}{2}} \tag{3.25}$$

quindi

$$F(T) = \left(\frac{m\omega}{2\pi i\hbar \sin \omega T}\right)^{\frac{1}{2}} \tag{3.26}$$

Quest'ultimo risultato termina l'espressione del nucleo per l'oscillatore armonico:

$$K(x'', x'; T) = \left(\frac{m\omega}{2\pi i\hbar \sin \omega T}\right)^{\frac{1}{2}} \exp\left[\frac{im\omega}{2\hbar \sin \omega T} \left[\left(x''^2 + x'^2\right) \cos \omega T - 2x''x'\right]\right]$$
(3.27)

Capitolo 4

Coordinate non cartesiane e spazi curvi

"If you like excitement, conflict and controversy, especially when nothing very serious is at stake, then you will love the history of quantization on the curved space" [11]. La definizione dell'integrale di cammino su spazi curvi è un problema più complesso rispetto ai precedenti, che ha dato origine anche a molte controversie. Le difficoltà nella trattazione sono strettamente legate al problema dell'ordinamento degli operatori e come tali hanno diverse soluzioni, nessuna delle quali davvero semplice. Nel presente capitolo studiamo queste problematiche.

4.1 Coordinate generiche per una varietà riemanniana

Vogliamo definire un integrale di cammino per una varietà riemanniana arbitraria Ddimensionale dotata di una metrica g_{ab} . Consideriamo preliminarmente la lagrangiana di una particella non relativistica su spazi curvi

$$L(q,\dot{q}) = \frac{m}{2}g_{ab}(q)\dot{q}^a\dot{q}^b - V(\vec{q})$$
(4.1)

dove $g_{ab}(q)$ è la metrica in coordinate arbitrarie. La corrispondente hamiltioniana è quindi data da

$$H(q,p) = \frac{1}{2m}g^{ab}(q)p_a p_b + V(\vec{q})$$
 (4.2)

dove p_a sono i momenti coniugati alle coordinate q^a . È evidente che sotto quantizzazione canonica emergono ambiguità di ordinamento. Queste ambiguità sono fortemente ridotte imponendo l'invarianza per cambio di coordinate, ma non completamente risolte. Infatti tale richiesta individua un sottoinsieme di ordinamenti possibili, lasciando non specificato

il termine di accoppiamento allo scalare di curvatura R. Si arriva così ad un operatore quantistico della forma (nella rappresentazione delle coordinate)

$$\hat{H} := \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_{LB} + \frac{\alpha \hbar^2}{2m} R(\vec{q}) + V(\vec{q}) \right]$$
(4.3)

dove α è un parametro arbitrario. Per convenienza fissiamo $\alpha = 0$, trasferendo il termine in R nel potenziale V; allora la meccanica quantistica di nostro interesse sarà definita dal problema di Schrödinger

$$\hat{H}\Psi(\vec{q},t) := \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_{LB} + V(\vec{q}) \right] \Psi(\vec{q},t) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\vec{q},t)$$
(4.4)

dove Δ_{LB} è l'operatore di Laplace-Beltrami, generalizzazione dell'operatore di Laplace per funzioni definite su varietà riemanniane

$$\Delta_{LB} := g^{-\frac{1}{2}} \partial_a g^{\frac{1}{2}} g^{ab} \partial_b = g^{ab} \partial_a \partial_b + (g^{ab} \Gamma_a + g^{ab}_{.a}) \partial_b \tag{4.5}$$

Vista la ridefinizione del laplaciano, appare ragionevole che anche gli operatori momento debbano essere corretti di conseguenza. La curvatura dello spazio modifica l'espressione di \hat{p}_a da $(\hbar/i)\partial_a$ a

$$\hat{p}_a = \frac{\hbar}{i} \left(\frac{\partial}{\partial q^a} + \frac{\Gamma_a}{2} \right) \tag{4.6}$$

Tali operatori risultano giustamente hermitiani rispetto al prodotto scalare $(f_1, f_2) = \int f_1 * f_2 \sqrt{g} dq$.

In generale, è difficile esplicitare la relazione tra \hat{H} e \hat{p} che segue dalla forma classica in (4.2), per via delle complicazioni legate all'ordinamento degli operatori. Per poter definire una relazione univoca che leghi quantità classiche ad operatori quantistici è necessario stabilire una regola di corrispondenza, i.e. una mappa lineare dalle funzioni dello spazio delle fasi classico agli operatori. Sia

$$M(n,m) = q^{\mu_1} q^{\mu_2} \dots q^{\mu_n} p_{\nu_1} \dots p_{\nu_m}$$
(4.7)

un monomio in coordinate e momenti classici, allora una regola di corrispondenza che generi gli operatori $\hat{\vec{q}}$ e $\hat{\vec{p}}$ è completamente definita dalla sua azione sulla funzione generatrice $\exp[i(\vec{u}\vec{q}+\vec{v}\vec{p})]$

$$\exp[i(\vec{u}\vec{q} + \vec{v}\vec{p})] \to D_{\Omega}(\vec{u}, \vec{v}; \hat{q}, \hat{p}) := \Omega(\vec{u}, \vec{v}) \exp[i(\vec{u}\hat{q} + \vec{v}\hat{p})]$$
(4.8)

e implica

$$M(n,m) \to \frac{1}{i^{n+m}} \frac{\partial^{n+m} D_{\Omega}(\vec{u}, \vec{v}; \hat{q}, \hat{\vec{p}})}{\partial u_{\mu_1} \dots \partial u_{\mu_n} \partial v^{\nu_1} \dots \partial v^{\nu_m}} |_{\vec{u} = \vec{v} = 0}$$

$$(4.9)$$

La scelta più comune consiste nel prendere D_{Ω} pari a 1 ed è conosciuta come regola di corrispondenza di Weyl. Ad essa è associata la prescrizione di ordinamento

$$(\hat{q}^n \hat{p}^m)_{Weyl} = \frac{1}{2^n} \sum_{l=0}^n \binom{n}{l} \hat{q}^{n-l} \hat{p}^m \hat{q}^l$$
 (4.10)

il che significa, per la funzione cui siamo interessati

$$(g^{ab}(\hat{q})\hat{p}_a\hat{p}_b)_{Weyl} = \frac{1}{4}[\hat{g}^{ab}(\hat{q})\hat{p}_a\hat{p}_b + 2\hat{p}_a\hat{g}^{ab}(\hat{q})\hat{p}_b + \hat{p}_a\hat{p}_b\hat{g}^{ab}(\hat{q})]$$
(4.11)

A questo punto siamo in grado di trovare l'equivalente operatoriale dell'hamiltoniana $H = \frac{1}{2m}g^{ab}(\vec{q})p_ap_b + V(\vec{q})$, specificando il termine di accoppiamento in R. Data un hamiltoniana classica, questa viene mappata nel corrispondente operatore da

$$\hat{H}(\hat{\vec{p}},\hat{\vec{q}}) = \int \exp\left(\frac{i}{\hbar}\vec{u}\hat{\vec{p}} + \frac{i}{\hbar}\vec{v}\hat{\vec{q}}\right)\Omega(\vec{u},\vec{v})\tilde{H}(\vec{u},\vec{v})d\vec{u}d\vec{v}$$
(4.12)

dove \tilde{H} indica la trasformata di Fourier

$$\tilde{H}(\vec{u}, \vec{v}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{2D}} \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\vec{u}\vec{p} - \frac{i}{\hbar}\vec{v}\vec{q}\right) H(\vec{p}, \vec{q}) d\vec{p} d\vec{q}$$
(4.13)

Per l'ordinamento di Weyl si trova

$$\hat{H} := \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_{LB} + V(\vec{q}) \right]
= \frac{1}{8} [\hat{g}^{ab}(\hat{\vec{q}}) \hat{p}_a \hat{p}_b + 2\hat{p}_a \hat{g}^{ab}(\hat{\vec{q}}) \hat{p}_b + \hat{p}_a \hat{p}_b \hat{g}^{ab}(\hat{\vec{q}})] + V(\vec{q}) + \Delta V_{Weyl}(\vec{q})$$
(4.14)

dove alla quantità di ordine \hbar^2 $\Delta V_{Weyl}(\vec{q})$ viene dato il nome di potenziale quantistico di Weyl

$$\Delta V_{Weyl}(\vec{q}) = \frac{\hbar^2}{8m} (g^{ab} \Gamma^d_{ac} \Gamma^c_{bd} - R) = \frac{\hbar^2}{8m} \left[g^{ab} \Gamma_a \Gamma_b + 2(g^{ab} \Gamma_a)_{,b} + 2g^{ab}_{,ab} \right]$$
(4.15)

Il termine $\frac{\hbar^2}{8m}g^{ab}\Gamma^d_{ac}\Gamma^c_{bd}$, non covariante, ristabilisce la covarianza dell'espressione totale correggendo la non covarianza di $\frac{1}{8}[\hat{g}^{ab}(\hat{q})\hat{p}_a\hat{p}_b+2\hat{p}_a\hat{g}^{ab}(\hat{q})\hat{p}_b+\hat{p}_a\hat{p}_b\hat{g}^{ab}(\hat{q})]$. Chiarito questo punto, nell'accingerci a ricavare finalmente l'espressione dell'integrale di cammino conviene fermarsi a notare che

$$\langle q''|(\hat{q}^n\hat{p}^m)|q'\rangle = \int \frac{dp}{2\pi\hbar} p^m e^{\frac{i}{\hbar}p(q''-q')} \left(\frac{q'+q''}{2}\right)^n \tag{4.16}$$

suggerisce che le quantità dipendenti dalle coordinate debbano essere valutate nel punto medio. Ora si chiama l'elemento di matrice

$$H_{eff}(\vec{p}, \vec{q}'', \vec{q}') = \left\langle \vec{q}'' | \hat{H}(\hat{\vec{p}}, \hat{\vec{q}}) | \vec{q}' \right\rangle \tag{4.17}$$

Hamiltoniana efficace, con \vec{p} preso invece nel punto finale, e siamo pronti per procedere al calcolo del propagatore. Come d'uso, si punta a una definizione a reticolo del tipo $(2.33)^1$. Allora il propagatore nell'approssimazione a breve intervallo temporale ϵ è

$$\langle \vec{q}_{j} | \exp[-\frac{i}{\hbar} \epsilon \hat{H}(\hat{\vec{p}}, \hat{\vec{q}})] | \vec{q}_{j-1} \rangle = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{D}}$$

$$\times \left\langle \vec{q}_{j} | \int d\vec{p} d\vec{q} \exp[-\frac{i}{\hbar} \epsilon \hat{H}(\hat{\vec{p}}, \hat{\vec{q}})] \int d\vec{u} d\vec{v} \exp[i(\vec{q} - \hat{\vec{q}})\vec{u} + i(\vec{p} - \hat{\vec{p}})\vec{v}] | \vec{q}_{j-1} \right\rangle$$

$$= \frac{1}{(2\pi\hbar)^{D}} \int_{\mathbf{R}^{D}} dp_{j} \exp\left[\frac{i}{\hbar} \vec{p}_{j} \Delta \vec{q}_{j} - \frac{i}{\hbar} \epsilon H_{eff}(\vec{p}_{j}, \underline{\vec{q}_{j}})\right]$$

$$(4.18)$$

dove $\underline{\vec{q}_j}$ è il j-esimo punto medio e $\Delta \vec{q}_j$ il j-esimo scarto tra punti consecutivi del reticolo. Viste le considerazioni preliminari, H_{eff} è data da

$$H_{eff}(\vec{p}_j, \underline{\vec{q}_j}) = \frac{1}{2m} g^{ab}(\underline{\vec{q}_j}) p_{a,j} p_{b,j} + V(\underline{\vec{q}_j}) + \Delta V_{Weyl}(\underline{\vec{q}_j})$$
(4.19)

Il nucleo hamiltoniano per il cammino totale si trova componendo i singoli (4.18) in

$$K(\vec{q}'', \vec{q}'; T) = \lim_{N \to \infty} \prod_{k=1}^{N-1} \int_{\mathbf{R}^D} d\vec{q}_k \prod_{l=1}^N \int_{\mathbf{R}^D} \frac{d\vec{p}_l}{(2\pi\hbar)^D} \exp\left[\frac{i}{\hbar} \sum_{j=1}^N \left(\vec{p}_j \Delta \vec{q}_j - \epsilon H_{eff}(\vec{p}_j, \underline{\vec{q}_j})\right)\right]$$

$$=: \int_{\vec{q}' = \vec{q}(t')}^{\vec{q}'' = \vec{q}(t')} \mathcal{D}(\vec{q}(t), \vec{p}(t)) \exp\left[\frac{i}{\hbar} \int_{t'}^{t''} \left(\vec{p}\dot{\vec{q}} - H_{eff}(\vec{p}, \vec{q})\right) dt\right]$$

$$(4.20)$$

Si noti che, mentre in \vec{q} si operano le usuali N-1 integrazioni, in \vec{p} se ne richiedono N. Inoltre i cammini in \vec{q} hanno gli estremi fissi, ma quelli in \vec{p} no. L'integrazione sui \vec{p} è risolvibile, poichè si tratta di un integrale gaussiano; dopo quest'ultimo passaggio si ottiene finalmente l'integrale sui cammini lagrangiano per una varietà D-dimensionale

 $^{^1}$ L'emergere di un potenziale proporzionale a \hbar^2 è intimamente collegato alla natura stocastica dei cammini di Feynman. Sebbene la procedura di segmentazione e successiva valutazione del limite sia la più usata, essa non è obbligata, come mostrano tra gli altri Morette e Cartier

con metrica g_{ab} nell'ordinamento di Weyl

$$K(\vec{q}'', \vec{q}; T) = [g(\vec{q}')g(\vec{q}'')]^{-\frac{1}{4}} \int_{\vec{q}' = \vec{q}(t')}^{\vec{q}' = \vec{q}(t')} \mathcal{D}_{MP} \vec{q}(t) \sqrt{g(\vec{q})} \exp\left[\frac{i}{\hbar} \int_{t'}^{t''} L_{eff}(\vec{q}, \dot{\vec{q}}) dt\right]$$

$$= [g(\vec{q}')g(\vec{q}'')]^{-\frac{1}{4}} \lim_{N \to \infty} \left(\frac{m}{2\pi i \epsilon \hbar}\right)^{\frac{N}{2}D} \left(\int_{\mathbf{R}^D} \prod_{l=1}^{N-1} d\vec{q}_l\right)$$

$$\times \prod_{k=1}^{N} \sqrt{g(\underline{\vec{q}_k})} \exp\left[\frac{i}{\hbar} \sum_{j=1}^{N} \left(\frac{m}{2\epsilon} g_{ab}(\underline{\vec{q}_j}) \Delta q_j^a \Delta q_j^b - \epsilon V(\underline{\vec{q}_j} - \epsilon \Delta V_{Weyl}(\underline{\vec{q}_j})\right)\right]$$

$$(4.21)$$

in cui

$$L_{eff}(\vec{q}, \dot{\vec{q}}) = \frac{m}{2} g_{ab}(\vec{q}) \dot{q}^a \dot{q}^b - V(\vec{q}) - \Delta V_{Weyl}(\vec{q})$$

$$(4.22)$$

Il pedice MP sta ad indicare la prescrizione di "mid-point" che emerge dall'uso dell'ordinamento di Weyl. Una prescrizione di ordine dà origine a un reticolo specifico, che fa emergere un diverso potenziale quantistico, il quale comunque rimane una correzione proporzionale a \hbar^2 . Quindi una manipolazione del reticolo si riflette sul potenziale quantistico; in alcuni casi con questo metodo si può arrivare a cancellare la correzione. Due delle più usate regole di ordinamento oltre a quella di Weyl sono la regola simmetrica e la antistandard:

• SIMMETRICA:

$$\Omega(u, v) = \cos \frac{uv}{2}
\frac{1}{2} (\hat{q}^n \hat{p}^m + \hat{p}^m \hat{q}^n)
H_{eff}(\vec{p}, \vec{q}'', \vec{q}') = \frac{1}{2} [H(\vec{p}, \vec{q}'') + H(\vec{p}, \vec{q}')] + \Delta V_{SR}(\vec{q}'')
\Delta V_{SR} = \frac{\hbar^2}{8m} [g_{,ab}^{ab} - 2g^{-\frac{1}{4}} \Delta_{LB} g^{\frac{1}{4}}]$$

• ANTI-STANDARD:

$$\Omega(u, v) = \exp\left[i\frac{uv}{2}\right]$$
$$\hat{p}^m \hat{q}^n$$
$$H_{eff}(\vec{p}, \vec{q}'', \vec{q}') = H(\vec{p}, \vec{q}') + \Delta V_{AS}$$
$$\Delta V_{AS} = \frac{\hbar^2}{6m} R$$

qui presentate elencando regola di corrispondenza, prescrizione di ordinamento, tipo di reticolo e potenziale quantistico.

Per lungo tempo l'integrale sui cammini nello spazio curvo è stato fonte di molte controversie e di parecchia confusione, con errori di calcolo e di metodo che si sono propagati nella letteratura. Un articolo spesso citato è il [1], in cui si cerca di arrivare alla formulazione di un'equazione di Schrödinger su una varietà qualsiasi partendo dall'integrale di Feynman in coordinate generiche e giungendo a risultati inaspettati e non corretti. Vediamo il procedimento seguito da Cheng. Posto m=1, in analogia a quanto fatto

precedentemente in tema di equazioni differenziali, si adatta la (2.40) per esprimere la funzione d'onda Ψ al tempo $t+\epsilon$

$$\Psi(\vec{q}(t+\epsilon), t+\epsilon) = \frac{1}{A} \int \exp\left[\frac{i}{\hbar} S(\vec{q}(t+\epsilon), \vec{q}(t))\right] \Psi(\vec{q}(t), t) \sqrt{g(\vec{q}(t))} d\vec{q}(t)$$
(4.23)

Nel limite $\epsilon \to 0$ il fattore esponenziale oscilla molto rapidamente, quindi solo i cammini in prossimità di quello stazionario per S saranno significativi nell'integrale. La regione che contribuisce è quella $|\Delta q| = |q(t+\epsilon) - q(t)| < \epsilon^{1/2}$, quindi si può espandere l'azione in serie di potenze di $\Delta \vec{q}$ [1]

$$S(\vec{q}(t+\epsilon), \vec{q}(t)) = \frac{1}{2\epsilon} g_{ij}(\vec{q}(t+\epsilon))$$

$$\times \left[\Delta q^i \Delta q^j - \Gamma^i_{mn} \Delta q^j \Delta q^m \Delta q^n + \frac{1}{4} \Gamma^i_{mn} \Gamma^j_{\alpha\beta} \Delta q^m \Delta q^n \Delta q^\alpha \Delta q^\beta + \right.$$

$$+ \frac{1}{3} \left(\frac{\partial}{\partial q_l} \Gamma^i_{mn} + \Gamma^i_{\alpha l} \Gamma^\alpha_{mn} \right) \Delta q^j \Delta q^m \Delta q^n \Delta q^l + \dots \right]$$

$$(4.24)$$

Si espandono in serie di potenze di $\Delta \vec{q}$ anche la metrica e la funzione d'onda:

$$\sqrt{g(\vec{q}(t))} = \sqrt{g(\vec{q}(t+\epsilon))} - \Delta q^i \frac{\partial \sqrt{g}}{\partial q^i} + \frac{1}{2} \Delta q^i \Delta q^j \frac{\partial^2 \sqrt{g}}{\partial q^i \partial q^j} + \dots$$
 (4.25)

$$\Psi(\vec{q}(t),t) = \Psi(\vec{q}(t+\epsilon),t) - \Delta q^i \frac{\partial \Psi}{\partial q^i} + \frac{1}{2} \Delta q^i \Delta q^j \frac{\partial^2 \Psi}{\partial q^i \partial q^j} + \dots$$
 (4.26)

Date queste approssimazioni si riscrive la (4.23) tenendo il termine di ordine zero $\frac{1}{2\epsilon}g_{ij}\Delta q^i\Delta q^j$ nell'esponenziale ed espandendo i termini di ordine più alto

$$\Psi(\vec{q}(t+\epsilon),t+\epsilon) = \frac{1}{A} \int \exp\left(\frac{1}{2\hbar\epsilon}g_{ij}\Delta q^i \Delta q^j\right)
\times \left[1 - \frac{i}{2\hbar\epsilon}g_{ij}\Gamma^i_{mn}\Delta q^j \Delta q^m \Delta q^n + \frac{1}{8\hbar\epsilon}g_{ij}\Gamma^i_{mn}\Gamma^j_{\alpha\beta}\Delta q^m \Delta q^n \Delta q^\alpha \Delta q^\beta + \right.
+ \frac{1}{6\hbar\epsilon}g_{ij}\left(\frac{\partial}{\partial q_l}\Gamma^i_{mn} + \Gamma^i_{\alpha l}\Gamma^\alpha_{mn}\right)\Delta q^j \Delta q^m \Delta q^n \Delta q^l +
- \frac{g_{ij}g_{st}}{8\hbar^2\epsilon^2}\Gamma^i_{mn}\Gamma^s_{\alpha\beta}\Delta q^j \Delta q^t \Delta q^m \Delta q^n \Delta q^\alpha \Delta q^\beta + \dots\right]
\times \left(\sqrt{g(\vec{q}(t+\epsilon))} - \Delta q^i \frac{\partial\sqrt{g}}{\partial q^i} + \frac{1}{2}\Delta q^i \Delta q^j \frac{\partial^2\sqrt{g}}{\partial q^i \partial q^j}\right)
\times \left(\Psi(\vec{q}(t+\epsilon),t) - \Delta q^i \frac{\partial\Psi}{\partial q^i} + \frac{1}{2}\Delta q^i \Delta q^j \frac{\partial^2\Psi}{\partial q^i \partial q^j} + \dots\right)d(\Delta q^N)$$
(4.27)

Questa lunga espressione viene semplificata dall'uso delle identità

$$\iint \dots \int \exp\left(\frac{i}{2\hbar\epsilon}g_{ij}\Delta q^i\Delta q^j\right)d(\Delta \vec{q}) = (i\hbar\pi\epsilon)^{\frac{N}{2}}g^{-\frac{1}{2}}$$
(4.28)

$$\iint \dots \int \exp\left(\frac{i}{2\hbar\epsilon}g_{ij}\Delta q^i\Delta q^j\right)\Delta q^{\alpha_1}\Delta q^{\alpha_2}\dots\Delta q^{\alpha_{2m}}d(\Delta\vec{q}) = (i\hbar\pi\epsilon)^{\frac{N}{2}}g^{-\frac{1}{2}}(g^{\alpha_1\alpha_2}g^{\alpha_3\alpha_4}\dots g^{\alpha_{2m-1}\alpha_{2m}})$$

$$(4.29)$$

La loro applicazione restituisce [1]

$$\Psi(\vec{q}(t+\epsilon),t) + \epsilon \frac{\partial \Psi}{\partial t} + \dots = \frac{(i\hbar\pi\epsilon)^{\frac{N}{2}}}{A} \times \left[\Psi(\vec{q}(t+\epsilon),t) + i\hbar\epsilon \left[\frac{1}{2} \frac{1}{\sqrt{g}} \frac{\partial}{\partial q^m} \left(\sqrt{g} g^{mn} \frac{\partial \Psi}{\partial q^n} \right) - \frac{R}{6} \Psi \right] \right]$$
(4.30)

La richiesta che l'equazione sopra sia valida nel limite $\epsilon \to 0$ richiede che l'equivalenza tenga anche all'ordine zero. Da questa proprietà si ricava il fattore di normalizzazione $A = (i\pi\hbar\epsilon)^{N/2}$. All'ordine ϵ si dovrebbe trovare l'equazione di Schrödinger

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2} \frac{1}{\sqrt{g}} \partial q^m \left(\sqrt{g} g^{mn} \frac{\partial \Psi}{\partial q^n} \right) + \frac{\hbar^2 R}{6} \Psi$$
 (4.31)

L'"equazione di Schrödinger" così derivata dall'integrale di Feynman differisce da quella usuale per il termine $\frac{\hbar^2 R}{6}$. Questa formulazione e quella tradizionale coincidono nel caso speciale di uno spazio piatto e nel limite $\epsilon \to 0$, ma non sono equivalenti. Per uno spazio a curvatura non nulla, infatti, le regole di quantizzazione canonica $[P_i,q^j]=i\hbar\delta_i^j$ sono ben poste solo nel caso particolare di una metrica a coefficienti costanti. Nella casistica generale la quantizzazione canonica non produce un'equazione di Schrödinger univoca. Nemmeno immergere la varietà in uno spazio euclideo di dimensione maggiore aiuta. I vincoli che restringono il moto nel sottospazio devono confinare la particella in uno strato sottile attorno allo stesso di spessore Δ . In meccanica classica qualunque vincolo non dissipativo darebbe lo stesso risultato per il limite $\Delta \to 0$, ma in meccanica quantistica l'energia di punto zero del vincolo, che ci si trova a dover considerare, rende la forma dell'equazione di Schrödinger dipendente da come il limite è stato preso. Il risultato (4.31) non è però corretto, visto il modo troppo arbitrario in cui è stata definito il nucleo (alla maniera di Dirac) da cui ha inizio il calcolo.

4.2 Coordinate sferiche

Si introducono le coordinate sferiche in D-dimensioni

$$x^{1} = r \cos \theta^{1}$$

$$x^{2} = r \sin \theta^{1} \cos \theta^{2}$$

$$x^{3} = r \sin \theta^{1} \sin \theta^{2} \cos \theta^{3}$$

$$\vdots$$

$$x^{D-1} = r \sin \theta^{1} \sin \theta^{2} \dots \cos \theta^{D-1}$$

$$x^{D} = r \sin \theta^{1} \sin \theta^{2} \dots \sin \theta^{D-1}$$

$$(4.32)$$

con $0 \leq \theta^{D-1} \leq 2\pi$ e gli angoli $0 \leq \theta^i \leq \pi.$ Il tensore metrico è

$$(g_{ab}) = diag(1, r^2, r^2 \sin^2 \theta^1, ..., r^2 \sin^2 \theta^1 ... \sin^2 \theta^{D-2})$$
(4.33)

La misura D-dimensionale $d\vec{x}$ espressa con queste coordinate è

$$d\vec{x} = r^{D-1}dr d\vec{\Omega}$$

$$d\vec{\Omega} = \prod_{k=1}^{D-1} (\sin \theta^k)^{D-1-k} d\theta^k$$
(4.34)

dove $d\Omega$ è l'elemento di superficie (D-1)-dimensionale della sfera a raggio unitario S^{D-1} . Il prodotto scalare si scrive con la formula nota

$$\vec{x}_1 \vec{x}_2 = r_1 r_2 \cos \phi_{(1,2)} \tag{4.35}$$

dove però l'angolo tra i due vettori è dato dalla formula di addizione

$$\cos\phi_{(1,2)} = \cos\theta_1^1\cos\theta_2^1 + \sum_{m=1}^{D-2}\cos\theta_1^{m+1}\cos\theta_2^{m+1}\prod_{n=1}^m\sin\theta_1^n\sin\theta_2^n + \prod_{n=1}^{D-1}\sin\theta_1^n\sin\theta_2^n \ \ (4.36)$$

Definiti tutti questi elementi, possiamo scrivere il nucleo per il problema a lagrangiana $(m\vec{x})/2 - V(|\vec{x}|)$ in funzione delle nuove coordinate

$$K(\vec{x}'', \vec{x}'; T) = K(r'', \vec{\Omega}'', r', \vec{\Omega}'; T)$$

$$= \lim_{N \to \infty} \left(\frac{m}{2\pi i \epsilon \hbar} \right)^{\frac{N}{2}D} \prod_{k=1}^{N-1} \int_{\mathbf{R}^D} d\vec{x}_k$$

$$\times \prod_{j=1}^N \exp \left[\frac{im}{2\epsilon \hbar} (\vec{x}_j^2 + \vec{x}_{j-1}^2 - 2\vec{x}_j \vec{x}_{j-1}) - \frac{i\epsilon}{\hbar} V(\vec{x}_j) \right]$$

$$= \lim_{N \to \infty} \left(\frac{m}{2\pi i \epsilon \hbar} \right)^{\frac{N}{2}D} \prod_{k=1}^{N-1} \int_0^\infty r_k^{D-1} dr_k \int d\vec{\Omega}_k$$

$$\times \prod_{j=1}^N \exp \left[\frac{im}{2\epsilon \hbar} (r_j^2 + r_{j-1}^2 - 2r_j r_{j-1} \cos \phi_{(j,j-1)}) - \frac{i\epsilon}{\hbar} V(r_j) \right]$$

$$(4.37)$$

Si vuole separare la parte angolare da quella radiale. L'unica occorrenza della variabile angolare è nel doppio prodotto in argomento alla funzione esponenziale. Tale termine ha espansione [6]

$$e^{z\cos\phi} = \left(\frac{z}{2}\right)^{-\nu} \Gamma(\nu) \sum_{l=0}^{\infty} (l+\nu) I_{l+\nu}(z) C_l^{\nu}(\cos\phi), \tag{4.38}$$

valida per ogni $\nu \neq 0, -1, -2...$, dove $\Gamma(\nu)$ è la funzione gamma in ν , $I_{\alpha}(z)$ è la funzione di Bessel modificata² e $C_l^{\nu}(z)$ sono i polinomi di Gegenbauer³. Sapendo che per le armoniche ipersferiche S_l^{μ} di grado l vale, come teorema di additività

$$\sum_{\mu=1}^{M} S_l^{\mu}(\vec{\Omega}_1) S_l^{\mu}(\vec{\Omega}_2) = \frac{1}{\Omega(D)} \frac{2l+D-2}{D-2} C_l^{\frac{D-2}{2}}(\cos\phi_{(1,2)}))$$
(4.39)

$$I_{\nu}(z) = e^{-\frac{\pi}{2}i\nu} J_{\nu} \left(e^{\frac{\pi}{2}i} z \right)$$

 3 Polinomi ortogonali definiti come i coefficienti di a^l nella espansione in serie di potenze

$$(1 - 2za + a^2)^{-\nu} = \sum_{l=0}^{\infty} C_l^{\nu}(z)a^n$$

Per i primi gradi si trova

$$\begin{split} C_0^{\nu}(z) &= 1 \\ C_1^{\nu}(z) &= 2\nu z \\ C_2^{\nu}(z) &= 2\nu(\nu+1)z^2 - \nu \end{split}$$

 $^{^2}$ Esprimibile come funzione di Bessel del primo tipo J_{ν} ad argomento immaginario

con M = (2l + D - 2)(l + D - 3)!/l!(D - 3)! e $1/\Omega(D)$ volume della sfera D-dimensionale; si può esprimere la relazione sopra per il nostro caso specifico:

$$e^{(r_1 r_2)(\vec{\Omega}_1 \vec{\Omega}_2)} = e^{(r_1 r_2)\cos\phi_{(1,2)}}$$

$$= 2\pi \left(\frac{2\pi}{r_1 r_2}\right)^{\frac{D-2}{2}} \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{\mu=1}^{M} S_l^{\mu}(\vec{\Omega}_1) S_l^{\mu}(\vec{\Omega}_2) I_{l+\frac{D-2}{2}}(r_1 r_2)$$
(4.40)

Con questa espansione il nucleo diventa

$$K(r'', \vec{\Omega}'', r', \vec{\Omega}'; T) = (r'r'')^{-\frac{D-2}{2}} \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{\mu=1}^{M} S_{l}^{\mu}(\vec{\Omega}') S_{l}^{\mu}(\vec{\Omega}'')$$

$$\times \lim_{N \to \infty} \left(\frac{m}{i\epsilon\hbar}\right)^{N} \prod_{k=1}^{N-1} \int_{0}^{\infty} r_{k} dr_{k} \prod_{j=1}^{N} \exp\left[\frac{im}{2\epsilon\hbar} (r_{j}^{2} + r_{j-1}^{2}) - \frac{i\epsilon}{\hbar} V(r_{j})\right] I_{l+\frac{D-2}{2}} \left(\frac{m}{i\epsilon\hbar} r_{j} r_{j-1}\right)$$

$$= (r'r'')^{-\frac{D-1}{2}} \frac{1}{\Omega(D)} \sum_{l=0}^{\infty} \left(\frac{2l+D-2}{D-2}\right) C_{l}^{\frac{D-2}{2}} (\cos(\phi_{(','')})) K_{l}(r'', r'; T)$$

$$(4.41)$$

Siamo arrivati a una formulazione del nucleo radiale, che può essere espressa in termini della misura di Feynman grazie alla definizione del peso funzionale non triviale $\mu_{\lambda}[r^2]$

$$\mu_{\lambda}^{N}[r^{2}] := \prod_{j=1}^{N} \sqrt{\frac{2\pi m r_{j} r_{j-1}}{i\epsilon\hbar}} \exp\left[-\frac{m}{i\epsilon\hbar} r_{j} r_{j-1}\right] I_{\lambda}\left(\frac{m}{i\epsilon\hbar} r_{j} r_{j-1}\right)$$
(4.42)

Il nucleo radiale ha allora formulazione

$$K_{l}(r'', r'; T) = \lim_{N \to \infty} \left(\frac{m}{2\pi i \epsilon \hbar} \right)^{\frac{N}{2}} \prod_{n=1}^{N-1} \int_{0}^{\infty} dr_{n} \mu_{l+\frac{D-2}{2}}^{N}[r^{2}]$$

$$\times \exp \left[\frac{i}{\hbar} \sum_{j=1}^{N} \left(\frac{m}{2\epsilon} (r_{j} + r_{j-1})^{2} - \epsilon V(r_{j}) \right) \right]$$

$$= \int_{r'=r(t')}^{r''=r(t'')} \mathcal{D}r(t) \mu_{l+\frac{D-2}{2}}[r^{2}] \exp \left[\frac{i}{\hbar} \int_{t'}^{t''} \left(\frac{m}{2} \dot{r}^{2} - V(r) \right) dt \right]$$
(4.43)

L'indicizzazione con l non è casuale, al contrario tale simbolo mantiene il significato standard nella meccanica quantistica di numero quantico orbitale. Nel nucleo radiale l'unico termine a dipenderne è il peso funzionale, attraverso il grado della funzione di Bessel modificata. La dipendenza dal momento angolare si esaurisce in questo termine: l'azione radiale viene definita solo con la sostituzione $x \to r$. Il termine centrifugo che ci si aspetterebbe e sembra mancare è in realtà rappresentato proprio dal peso funzionale. Per D=3 infatti, esso corrisponde al potenziale centrifugo $\frac{\hbar^2}{2m}\frac{l(l+1)}{r^2}$.

4.2.1 Oscillatore armonico radiale

Cerchiamo una soluzione per l'oscillatore armonico radiale a frequenza variabile nel tempo, l'applicazione più importante delle ultime formule ricavate.

$$L = \frac{m}{2}(\dot{r}^2 - \omega^2(t)r^2) \tag{4.44}$$

Quindi, dalla (4.43), il nucleo radiale ha forma

$$K_{l}(r'', r'; t'', t') = \int_{r'}^{r''} \mathcal{D}r(t)\mu_{l+\frac{D-2}{2}}[r^{2}] \exp\left[\frac{i}{\hbar} \frac{m}{2} \int_{t'}^{t''} (\dot{r}^{2} - \omega^{2}(t)r^{2})\right] dt$$

$$= \lim_{N \to \infty} \left(\frac{m}{2\pi i \epsilon \hbar}\right)^{\frac{N}{2}} \prod_{n=1}^{N-1} \int_{0}^{\infty} dr_{n} \mu_{l+\frac{D-2}{2}}^{N}[r^{2}] \exp\left[\frac{i}{\hbar} \frac{m}{2} \sum_{j=1}^{N} \left(\frac{(r_{j} - r_{j-1})^{2}}{\epsilon} - \epsilon \omega_{j}^{2} r_{j}^{2}\right)\right]$$

$$(4.45)$$

Si operano le sostituzioni

$$\alpha = \frac{m}{\epsilon \hbar}$$

$$\beta_j = \alpha \left(1 - \frac{\epsilon^2 \omega_j^2}{2}\right)$$
(4.46)

con cui l'integrale di cammino diventa

$$K(r'', r'; t'', t') = \sqrt{r'r''} \lim_{N \to \infty} \left(\frac{\alpha}{i}\right)^N e^{\frac{i\alpha}{2}(r'^2 + r''^2)}$$

$$\times \prod_{j=1}^{N-1} \int_0^\infty r_j dr_j \exp\left[i(\beta_1 r_1^2 + \beta_2 r_2^2 + \dots + \beta_{N-1} r_{N-1}^2)\right]$$

$$\times \left[I_{l+\frac{D-2}{2}}(-i\alpha r_0 r_1)I_{l+\frac{D-2}{2}}(-i\alpha r_1 r_2)\dots I_{l+\frac{D-2}{2}}(-i\alpha r_{N-1} r_N)\right]$$
(4.47)

In [10] si mostra la validità della formula

$$\int_0^\infty \exp(i\beta r^2) I_{\nu}(-i\alpha r) I_{\nu}(-i\gamma r) r dr = \frac{i}{2\beta} \exp\left[\frac{-i(\alpha^2 + \gamma^2)}{4\beta}\right] I_{\nu}\left(-i\frac{\alpha\gamma}{2\beta}\right)$$
(4.48)

per $Re(\nu) > -1$. La conoscenza del valore di questo integrale permette di applicare il metodo di calcolo del nucleo sviluppato nella sezione sulla particella libera. La sua applicazione ripetuta fornisce il risultato

$$K(x'', x'; t'', t') = \sqrt{r'r''} \lim_{N \to \infty} \left(\frac{\alpha}{i}\right)^N e^{\frac{i\alpha}{2}(r'^2 + r''^2)} \frac{1}{C} \exp\left[B'r'^2 + B''r''^2\right] I_{l + \frac{D-2}{2}}(Ar'r'')$$
(4.49)

Nel limite $N \to \infty$ i fattori moltiplicativi hanno la forma

$$K_{l}(x'', x'; t'', t') = \sqrt{r'r''} \frac{m}{i\hbar\eta(T)} \exp\left[\frac{im}{2\hbar} \left(\frac{\xi(T)}{\eta(T)}r'^{2} + \frac{\dot{\eta}(T)}{\eta(T)}r''^{2}\right)\right] I_{l+\frac{D-2}{2}} \left(\frac{m}{i\hbar\eta(T)}r'r''\right)$$
(4.50)

dove i nuovi coefficienti sono definiti dai problemi di Cauchy

$$\ddot{\eta} + \omega^2(t)\eta = 0, \qquad \eta(t') = 0, \quad \dot{\eta}(t') = 1$$
 (4.51)

$$\ddot{\xi} + \omega^2(t)\xi = 0, \qquad \xi(t') = 0, \quad \dot{\xi}(t') = 1$$
 (4.52)

Nel caso particolare di un oscillatore a frequenza costante nel tempo il sistema ha la semplice soluzione

$$\eta(t) = \frac{1}{\omega} \sin \omega (t - t')
\dot{\eta}(t) = \cos \omega (t - t')
\xi(t) = \cos \omega (t - t')$$
(4.53)

il che completa l'integrale sui cammini radiale

$$K_{l}(r'', r'; T) = -i\sqrt{r'r''} \frac{m\omega}{\hbar \sin \omega T} \exp \left[\frac{im\omega}{2\hbar} (r'^{2} + r''^{2}) \cot \omega T \right]$$

$$\times I_{l + \frac{D-2}{2}} \left(-\frac{im\omega}{\hbar \sin(\omega T)} r' r'' \right)$$
(4.54)

La formula di Hille-Hardy connette il prodotto tra esponenziale e funzione di Bessel modificata con i polinomi di Laguerre. La sua applicazione al nucleo radiale per l'oscillatore armonico a ω costante permette di esprimere quest'ultimo nella forma del tipo (2.40), in cui, come si era fatto per la particella libera, si possono riconoscere gli autovalori dell'energia e le funzioni d'onda radiali corretti resi familiari dalla meccanica ondulatoria.

Conclusioni

In questa tesi si è trattata una formulazione della meccanica quantistica alternativa al formalismo operatoriale canonico. Tale teoria è impostata sul concetto intuitivo che una particella quantistica esplori tutti cammini possibili e che ad ognuno di essi sia associata un'ampiezza di probabilità. Si è visto come lo spunto teorico per valutare correttamente questa ampiezza risieda in una teoria quantistica delle trasformazioni di contatto alla Hamilton-Jacobi, sviluppata completamente da Dirac. Nonostante l'importanza dei risultati presentati in [3] (e cioè l'esistenza di una stretta connessione tra il propagatore quantistico e la quantità classica $\exp[iS/\hbar]$) sia fondamentale, l'articolo contiene due incorrettezze, il cui superamento è l'essenza del lavoro di Feynman. Prima di tutto non vengono considerati termini correttivi di ordine \hbar all'azione valutata sulla traiettoria classica, che sono trascurabili solo quando il propagatore sia calcolato su un intervallo di tempo infinitesimale; poi la stessa leggerezza viene commessa nella valutazione dell'integrale (2.27). Feynman in [4] esplicita coerentemente le integrazioni intermedie della (2.27) arrivando a definire la relazione tra le due quantità come una proporzionalità. Il fattore moltiplicativo è costituito dalla pseudomisura in (2.33) (nucleo di Feynman), che può essere definita in maniera matematicamente rigorosa come misura di Wiener una volta che tale integrale sia stato sottoposto a una rotazione di Wick $t \to it$. Questa valutazione fa emergere anche il carattere stocastico dei cammini, che risultano essere di tipo browniano (continui ovunque ma non differenziabili). La (2.33) contiene da sola tutta la formulazione della meccanica quantistica di Feynman ma, nonostante sia molto suggestiva, per scopi pratici viene utilizzata nella quasi totalità dei casi la formulazione a reticolo (2.32). Il nucleo viene mostrato essere un'ampiezza di probabilità, e come tale passibile di una legge di composizione per eventi successivi, che permette di costruire la funzione d'onda per il sistema. Sia la funzione d'onda così ottenuta che il nucleo risolvono le rispettive equazioni di Schrödinger, il che dimostra l'equivalenza della formulazione qui presentata della meccanica quantistica con quella operatoriale. Viene poi sviluppata una teoria perturbativa per la valutazione di sistemi a lagrangiana non quadratica. L'ampiezza di probabilità per il moto di una particella da a a b in un potenziale V(x,t)risulta essere la somma delle alternative sul numero di diffusioni che essa subisce: essa potrebbe viaggiare come una particella libera, essere disturbata da un evento di scattering, da due, da n. Questa interpretazione è alla base della tecnica rappresentativa dei diagrammi di Feynman. Sistemi a lagrangiana quadratica, invece, possono essere risolti esattamente con varie tecniche. Due di queste, la valutazione iterata di integrali gaussiani e l'espansione dei cammini attorno al valore stazionario con successiva valutazione in serie di Fourier dello scostamento da esso, sono applicati ai sistemi fondamentali della particella libera e dell'oscillatore armonico. Il nucleo ottenuto è soluzione dell'equazione di Schrödinger e, se manipolato con una trasformazione di Fourier, può essere scritto in modo da rendere evidente le funzioni d'onda e i relativi spettri energetici del sistema in considerazione. In ultimo, si è visto come i problemi legati all'ordinamento degli operatori nel tentativo di formulare una teoria quantistica su superfici curve facciano emergere nell'hamiltoniana termini proporzionali alla curvatura della varietà in esame. Per quanto riguarda gli integrali di cammino, la scelta di un ordinamento specifico include implicitamente la scelta di un reticolo, che dà origine a un potenziale correttivo di ordine \hbar^2 conosciuto come potenziale quantistico. Nella definizione di integrale di cammino in coordinate sferiche emerge un peso non triviale $\mu_{\lambda}[r^2]$ nell'integrale di Feynman radiale che fa le veci del potenziale centrifugo. I risultati dell'ultimo capitolo sono impiegati nella risoluzione dell'oscillatore armonico radiale, qui portato a termine riprendendo il metodo iterativo sviluppato nella sezione dedicata alla particella libera.

Bibliografia

- [1] Cheng, K.S.: Quantization of a General Dynamical System by Feynman's Path Integration Formulation, Journal of Mathematical Physics (1972)
- [2] Dirac, P.A.M.: The Principles of Quantum Mechanics, Oxford at the Clarendon Press (1930)
- [3] Dirac, P.A.M.: The Lagrangian in Quantum Mechanics, Physikalische Zeitschrift der Sowjetunion (1933)
- [4] Feynman, Richard P.: Space time approach to non relativistic quantum mechanics, Review of Modern Physics (1949)
- [5] Feynman, Richard P.; Hibbs, Albert H.: Quantum Mechanics and Path Integrals, emended by Daniel F. Styer, Dover Publications (1965)
- [6] Gradshteyn, I. S.; Ryzhik, I. M.: Tabel of Integrals, Series and Products, Academic Press (2007)
- [7] Grosche, C.; Steiner, F.: Path integrals on curved manifolds, Z. Phys. C Particles and Fields (1987)
- [8] Grosche, C.; Steiner, F.: Handbook of Feynman Path Integrals, Springer Tracs in Modern Physics (1998)
- [9] Landau, Lev D.; Lifshitz, Evgenij M.: Fisica teorica vol1: Meccanica Classica, Editori Riuniti university press (2003)
- [10] Peak, D.; Inomata, A.: Summation over Feynman Histories in Polar Coordinates, Journal of Mathematical Physics (1969)
- [11] Schulman, L.: Techniques and Application of Path Integration, J. Wiley and Sons (1981)