Path integral in Meccanica Quantistica – parte 1

Luca Alfinito, aprile 2021

1. Un'introduzione matematica

Questa modesta trattazione del Path Integral si pone per obiettivo quello di seguire un preciso filo logico nella narrazione, a partire dalle proprietà principali che derivano da uguaglianze matematiche note. Per questo motivo è doveroso cominciare riferendosi alla prima, più importante proprietà del prodotto di potenze, qui già espressa nel caso in cui la base sia la costante di Eulero *e*:

$$\prod_i e^{A(i)} = e^{\sum_i A(i)}$$

Eq. 1-1

Secondariamente si deve sempre far riferimento all'integrale Gaussiano monodimensionale (per il caso reale, *a*>0):

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx\, e^{-ax^2+bx} = \sqrt{\frac{\pi}{a}}\, e^{\frac{b^2}{4a}}$$

Eq. 1-2

Tale relazione, che può essere dimostrata con la tecnica del completamento del quadrato all'esponente, vale ovviamente anche nel caso in cui *a* abbia una parte immaginaria. In questo contesto conviene valutare il risultato dell'integrale Gaussiano complesso che mescola tra loro più *n* gradi di libertà (in cui è stato aggiunto un fattore ½ per futura comodità):

$$\int_{-\infty}^{\infty} dq_1 \ldots dq_n\, e^{-\sum_{i,j}^{n} \frac{1}{2} q_i A_{ij} q_j} = (2\pi)^{n/2} \frac{1}{\sqrt{\det(\mathbf{A})}}$$

Eq. 1-3

Nella fattispecie l'integrale converge per una matrice simmetrica se tutti gli autovalori di Re**A** sono non negativi, e tutti gli autovalori di **A** sono diversi da 0. L'Eq. 1-3 si può dimostrare operando un opportuno cambio di base che diagonalizzi A. Questa trasformazione ha Jacobiano pari ad uno e permette di fattorizzare l'integrale isolando i singoli auto valori:

$$\int_{-\infty}^{\infty} dq_1 \ldots dq_n\, e^{-\sum_{i,j}^{n} \frac{1}{2} q_i A_{ij} q_j} = \prod_{i=1}^{n} \int dy_i\, e^{-a_i y^2}$$

Eq. 1-4

Ed utilizzare i risultati di Eq. 1-1 e Eq. 1-2.

Dimostriamo infine il risultato di integrazione del generico integrale Gaussiano:

$$\int_{-\infty}^{\infty} dq_1 \ldots dq_n \, e^{-\sum_{i,j}^{n} \frac{1}{2} q_i A_{ij} q_j + \sum_{i=1}^{n} b_i q_i} = (2\pi)^{n/2} \frac{1}{\sqrt{\det(\mathbf{A})}} e^{\sum_{i,j}^{n} \frac{1}{2} b_i \left(A^{-1}\right)_{ij} b_j}$$

Eq. 1-5

Per raggiungere l’obiettivo cerchiamo il valore estremo della forma quadratica, con l’usuale metodo:

$$0 = \frac{\partial}{\partial q_k} \left(\sum_{i,j}^{n} \frac{1}{2} q_i A_{ij} q_j - \sum_{i=1}^{n} b_i q_i \right) \quad \Leftrightarrow \quad A_{kj} q_j - b_k = 0 \quad \Leftrightarrow \quad q_i = \left(A^{-1}\right)_{ik} b_k$$

Eq. 1-6

Questo ci permette di riscalare e traslare debitamente le coordinate in modo da ricondursi ad un integrale privo della forma Eq. 1-4, attraverso la sostituzione che realizza la seguente:

$$q_i = \left(A^{-1}\right)_{ik} b_k + y_i$$

Eq. 1-7

In questo modo l’integrale diventa:

$$\int_{-\infty}^{\infty} dq_1 \ldots dq_n \, e^{-\sum_{i,j}^{n} \frac{1}{2} q_i A_{ij} q_j + \sum_{i=1}^{n} b_i q_i} = \left[e^{\sum_{i,j}^{n} \frac{1}{2} b_i \left(A^{-1}\right)_{ij} b_j} \right] \int_{-\infty}^{\infty} dy_1 \ldots dy_n \, e^{-\sum_{i,j}^{n} \frac{1}{2} y_i A_{ij} y_j} = (2\pi)^{n/2} \frac{1}{\sqrt{\det(\mathbf{A})}} e^{\sum_{i,j}^{n} \frac{1}{2} b_i \left(A^{-1}\right)_{ij} b_j}$$

Eq. 1-8

2. Funzione generatrice

Forti dei risultati precedenti, proseguiamo addentrandoci nell’uso pratico di questi integrali. Supponiamo che una certa funzione di n gradi di libertà abbia una distribuzione di probabilità di tipo Gaussiano. Possiamo allora scrivere:

$$\left\langle F(q_1, \ldots, q_n) \right\rangle = N \int_{-\infty}^{\infty} dq_1 \ldots dq_n F(q_1, \ldots, q_n) e^{-\sum_{i,j}^{n} \frac{1}{2} q_i A_{ij} q_j}$$

Eq. 2-1

In cui *N* rappresenta ovviamente il fattore di normalizzazione che scaturisce dal risultato dell’Eq. 1-3:

$$N = (2\pi)^{-n/2} \sqrt{\det(\mathbf{A})}$$

Eq. 2-2

Introduciamo allora la cosiddetta funzione generatrice:

$$Z(\mathbf{A},\mathbf{b}) = \int_{-\infty}^{\infty} dq_1 \dots dq_n \, e^{-\sum_{i,j}^{n}\frac{1}{2}q_i A_{ij} q_j} e^{\mathbf{b}\cdot\mathbf{q}} = \int_{-\infty}^{\infty} dq_1 \dots dq_n \, e^{-\sum_{i,j}^{n}\frac{1}{2}q_i A_{ij} q_j} e^{b_i q_i}$$

Eq. 2-3

È possibile esprimere alcune grandezze in funzione di ***Z***. Per prima cosa è evidente che:

$$N = \frac{1}{Z(\mathbf{A},0)}$$

Eq. 2-4

Per come è definita e per quanto detto nell'Eq. 2-4 vale quindi:

$$\frac{Z(\mathbf{A},\mathbf{b})}{Z(\mathbf{A},0)} = \left\langle e^{\mathbf{b}\cdot\mathbf{q}} \right\rangle$$

Eq. 2-5

La funzione si dice generatrice perché appunta genera i momenti della distribuzione, ossia i valori di aspettazione di quantità monomiali del tipo:

$$\left\langle q_{k_1} q_{k_2} \dots q_{k_l} \right\rangle = N \int_{-\infty}^{\infty} dq_1 \dots dq_n \, q_{k_1} q_{k_2} \dots q_{k_l} \, e^{-\sum_{i,j}^{n}\frac{1}{2}q_i A_{ij} q_j} = N \left[\frac{\partial}{\partial b_{k_1}} \frac{\partial}{\partial b_{k_2}} \dots \frac{\partial}{\partial b_{k_l}} \int_{-\infty}^{\infty} dq_1 \dots dq_n \, e^{-\sum_{i,j}^{n}\frac{1}{2}q_i A_{ij} q_j} e^{b_i q_i} \right]\Bigg|_{\mathbf{b}=0} =$$

$$= \frac{1}{Z(\mathbf{A},0)} \left[\frac{\partial}{\partial b_{k_1}} \frac{\partial}{\partial b_{k_2}} \dots \frac{\partial}{\partial b_{k_l}} Z(\mathbf{A},\mathbf{b}) \right]\Bigg|_{\mathbf{b}=0}$$

Eq. 2-6

Utilizzando il risultato dell'Eq. 1-8:

$$\left\langle q_{k_1} q_{k_2} \dots q_{k_l} \right\rangle = \left[\frac{\partial}{\partial b_{k_1}} \frac{\partial}{\partial b_{k_2}} \dots \frac{\partial}{\partial b_{k_l}} e^{\sum_{i,j}^{n}\frac{1}{2} b_i \left(A^{-1}\right)_{ij} b_j} \right]\Bigg|_{\mathbf{b}=0}$$

Eq. 2-7

In generale dunque se la distribuzione è di tipo Gaussiano e una funzione *F* è esprimibile come serie di potenze si ha:

$$\left\langle F(q_1,\dots,q_n) \right\rangle = \left[F\left(\frac{\partial}{\partial b}\right) e^{\sum_{i,j}^{n}\frac{1}{2} b_i \left(A^{-1}\right)_{ij} b_j} \right]\Bigg|_{\mathbf{b}=0}$$

Eq. 2-8

3. Il teorema di Wick

Per comodità di notazione (e anche per motivi storici) indicheremo:

$$\mathbf{\Delta} = \mathbf{A}^{-1}$$

Eq. 3-1

Cosicché:

$$\langle q_{k_1} q_{k_2} \dots q_{k_l} \rangle = \left[\frac{\partial}{\partial b_{k_1}} \frac{\partial}{\partial b_{k_2}} \dots \frac{\partial}{\partial b_{k_l}} e^{\sum_{i,j}^{n} \frac{1}{2} b_i \Delta_{ij} b_j} \right]\Bigg|_{\mathbf{b}=0}$$

Eq. 3-2

È immediato notare come ad ogni operazione di derivazione venga prodotto fuori dall'esponenziale un fattore *b*, che se non viene riassorbito da una derivazione successiva porta all'annullamento del termine quando si pone **b**=0. Infatti:

$$\frac{\partial}{\partial b_k} e^{\sum_{i,j}^{n} \frac{1}{2} b_i \Delta_{ij} b_j} = \frac{1}{2}\left(\Delta_{kj} b_j + b_i \Delta_{ik}\right) e^{\sum_{i,j}^{n} \frac{1}{2} b_i \Delta_{ij} b_j} = \Delta_{kj} b_j e^{\sum_{i,j}^{n} \frac{1}{2} b_i \Delta_{ij} b_j}$$

Eq. 3-3

Dove si è sfruttato il fatto che l'inversa di una matrice simmetrica è simmetrica, e ridefinito gli indici. Con una seconda derivazione:

$$\frac{\partial}{\partial b_r} \frac{\partial}{\partial b_k} e^{\sum_{i,j}^{n} \frac{1}{2} b_i \Delta_{ij} b_j} = \frac{\partial}{\partial b_r} \Delta_{kj} b_j e^{\sum_{i,j}^{n} \frac{1}{2} b_i \Delta_{ij} b_j} = \Delta_{kj} \delta_{jr} e^{\sum_{i,j}^{n} \frac{1}{2} b_i \Delta_{ij} b_j} + \Delta_{kj} b_j \left(\Delta_{rj} b_j e^{\sum_{i,j}^{n} \frac{1}{2} b_i \Delta_{ij} b_j} \right)$$

Eq. 3-4

Si calcola quindi il risultato per **b**=0, che porta ad eliminare l'esponenziale e cancellare tutti i termini che contengono almeno un elemento *b*.

$$\frac{\partial}{\partial b_r} \frac{\partial}{\partial b_k} e^{\sum_{i,j}^{n} \frac{1}{2} b_i \Delta_{ij} b_j} \Bigg|_{\mathbf{b}=0} = \Delta_{kj} \delta_{jr} e^{\sum_{i,j}^{n} \frac{1}{2} b_i \Delta_{ij} b_j} \Bigg|_{\mathbf{b}=0} = \Delta_{kr}$$

Eq. 3-5

Di conseguenza è facile concludere che sopravvivono solo tutti termini costruiti mediante coppie, che è il risultato fondamentale noto come Teorema di Wick e riveste un ruolo chiave, tra i vari aspetti, nella teoria perturbativa a seguire.

$$\left\langle q_{k_1} q_{k_2} \dots q_{k_l} \right\rangle = \sum_{\substack{\text{tutti i possibili} \\ \text{accoppiamenti} \\ \text{rimescolati} \\ \text{P di } k_1,\dots,k_l}} \Delta_{k_{P_1} k_{P_2}} \dots \Delta_{k_{P_{l-1}} k_{P_l}} = \sum_P \left\langle q_{k_{P_1}} q_{k_{P2}} \right\rangle \dots \left\langle q_{k_{P_l}} q_{k_{P_{l-1}}} \right\rangle$$

Eq. 3-6

In generale il valore di aspettazione del prodotto di un numero pari 2*p* di variabili (dispari sarebbe nullo!) è dato da *(2p-1)(2p-3)…5x3x1* termini.

Referenze

[1] D. Antonov, “Nonperturbative methods in gauge theories”, Pisa University Press, 2013

[2] J. Zinn-Justin, “Path Integrals in Quantum Mechanics”, Oxford University Press, 2005

[3] N. Cabibbo, L. Maiani, O. Benhar, “Introduzione alle teorie di gauge”, Editori Riuniti, 2016