University of M’sila

Science Faculty

Physics department

Second-year Master of Theoretical Physics

Classical and quantum mechanics of time-dependent systems

The college year 2020-2021

Chapter 1

PATH INTEGRALS IN NON-RELATIVISTIC QUANTUM MECHANICS

In this chapter, we study the concepts of propagators in the framework of non-relativistic quantum theory. To simplify we work with one coordinate only and then we generalize the results to the case of two and three dimensions.

في هذا الفصل سندرس مفاهيم الناشر في إطار الميكانيك الكمي اللانسبي. للتبسيط سنتعامل مع مركبة واحدة ثم نعمم النتائج لحالتي ثنائي وثلاثي البعد.

Propagator of the Schrödinger equation

It is well known that the nonrelativistic particle in a one-dimensional potential $V(x)$ can be described by the following Schrödinger equation :

من المعلوم أن الجسيم اللانسبي الخاضع لتاثير الكمون $V(x)$ يمكن وصفه من خلال معادلة شرودينغر التالية:

$$\begin{aligned} -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\Psi(x,t)}{\partial x^2}+V(x)\Psi(x,t) &= i\hbar\frac{\partial\Psi(x,t)}{\partial t} \\ &= \hat{H}\Psi(x,t) \end{aligned} \tag{1}$$

Wher $\hbar=\dfrac{h}{2\Pi}$ is the reduced Planck constant and $\hat{H}$ is the Hamiltonian operator. This equation can be rewritten into the following equivalent form :

حيث $\hbar=\dfrac{h}{2\Pi}$ يرمز لثابت بلانك المختصر و $\hat{H}$ هو مؤثر الهاميلتونيان. يمكن إعادة كتابة المعادلة أعلاه وفق الشكل المكافئ:

$$\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial t}-H\right)\Psi(x,t)=0 \tag{2}$$

The Green’s function $K(x,t,x_i,t_i)$ of the Schrödinger equation is defined as a solution of the following equation :

دلة قرين $K(x,t,x_i,t_i)$ لمعادلة شرودينغر تعرف كحل للمعادلة التالية:

$$\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial t}-H\right)K(x,t,x_i,t_i)=i\hbar\delta(x-x_i)\delta(t-t_i) \tag{3}$$

It is also called the propagator.

و هي أيضا تسمى بالناشر.

The propagator $K(x,t,x_i,t_i)$ postulated to satsfy the following intial condition :

الناشر $K(x,t,x_i,t_i)$ يسلم بأنه يحقق الشرط الابتداىٔ التالي:

$$K(x,t_i+0,x_i,t_i)=\delta(x-x_i) \tag{4}$$

It is possible to propose the following solution of the Schrödinger equation which written in Eq. (2) as follows :

بالإمكان أقتراح الحل التالي لمعادلة شرودينغر المعبر عنها في المعادلة رقم 2 :

$$\Psi(x,t)=\int K(x,t,x_i,t_i)\Psi(x_i,t_i)dx_i \tag{5}$$

We can be proven by replacing a proposed solution in Eq. (2)

يمكن التحقق من ذلك مباشرة بتعويض الحل المقترح في المعادلة رقم 2.

The proposed solution to Schrödinger's equation gives us the wave function at any time t that follows, the initial time t_i.

إن الحل المقترح لمعادلة شرودينغر يعطينا دالة الموجة في أي لحظة زمنية t تاتي بعد اللحظة الابتدائية.

The propagator $K(x,t,x_i,t_i)$ is interpreted as a probability amplitude for a transition from the initial coordinate x_i at the initial time t_i to the final position x at letter time t.

الناشر $K(x,t,x_i,t_i)$ يفسر بانه سعة احتمال للانتقال من الاحداثية الابتدائية x_i في اللحظة الابتدائية t_i للوضع الانهائي x في اللحظة النهائية t.

Homework 1

Show the propagator $K(x,t,x_i,t_i)$ in terms of the eigenfunctions $\varphi_n(x)$ and eigenvalues E_n of the underlying Hamiltonian operator $\hat{H}$ can be expressed as follows :

بين ان الناشر $K(x,t,x_i,t_i)$ يمكن التعبير عنه بدلالة دوال الموجة $\varphi_n(x)$ و قيمها الذاتية E_n الناتجة من مؤثر الهاميلتونيان $\hat{H}$:

$$K(x,t,x_i,t_i)=\Theta(t-t_i)\sum_n \varphi_n^*(x_i)\varphi_n(x)\exp\left(-\frac{i}{\hbar}E_n(t-t_i)\right) \tag{6}$$

Whereas

$$
\begin{cases}
\hat{H}\varphi_n(x) = E_n\varphi_n(x) \\
\sum_n \varphi_n^*(x_i)\varphi_n(x) = \delta(x - x_i) \\
\Theta(t - t_i) = \begin{cases} 0 & \text{for} \quad t \prec 0 \\ 1 & \text{for} \quad t \geq 0 \end{cases}
\end{cases}
\tag{7}
$$

Homework 2

Show the propagator $K(x,t,x_i,t_i)$ in Eq. (6) can be expressed in the Heisenberg representation as follows :

بين ان الناشر $K(x,t,x_i,t_i)$ المعبر عنه في المعادلة رقم 6 يمكن كتابته في تمثيل هايزنبرغ كمايلي:

$$
\begin{aligned}
K(x,t,x_i,t_i) &= \Theta(t - t_i)\left\langle x \left| \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\hat{H}(t - t_i)\right) \right| x_i \right\rangle \\
&= \langle x,t \| x_i, t_i \rangle
\end{aligned}
\tag{8}
$$

Where

$$
\begin{cases}
|x_i, t_i\rangle = \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t_i \right) |x_i\rangle \\
|x, t\rangle = \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t \right) |x\rangle
\end{cases}
\tag{9}
$$

Here $\hat{H}$ is the time-independent Hamiltonian operator. For simplicity, we shall consider in the first instance a system described by a generalized Q with a conjugate momentum P, we have for the Shrodinger picture :

هنا $\hat{H}$ نقصد به مؤثر الهاميلتونيان المستقل عن الزمن. للتبسيط نعتبر في البدء أن النظام يوصف بالحالة المعممة Q و عزمها المرافق P , لدينا صورة شرودينغر:

$$
\hat{Q}_s |q\rangle_s = q|q\rangle_s \tag{11}
$$

Since $\hat{Q}_H$ is time-dependent for Heisenberg picture, so are its eigenstates $|q,t\rangle$ satisfied the following postulate :

بما أن صورة هايزنبرغ $\hat{Q}_H$ تعتمد على الزمن ، و بالتالي حالتها الشعاعية $|q,t\rangle$ تحقق المسلمة التالية:

$$
\hat{Q}_H(t)|q,t\rangle = q|q,t\rangle \tag{12}
$$

The relevant connections between the two pictures are given by :

الروابط ذات الصلة بين الصورتين معطاة من خلال:

$$\hat{Q}_H(t) = \exp\left(i\hat{H}t/\hbar\right)\hat{Q}_s \exp\left(-i\hat{H}t/\hbar\right) \tag{13}$$

And

$$\left|q,t\right\rangle = \exp\left(i\hat{H}t/\hbar\right)\left|q\right\rangle_s \tag{14}$$

The probability amplitude that a physical system which was in the eigenstate $\left|q_i,t_i\right\rangle$ at the time t_i will be found to have the value q of the operator Q at time t is given by :

سعة الاحتمال التي تصف الحالة الفيزيائية للنظام الذي كان في الحالة $\left|q_i,t_i\right\rangle$ في الزمن t_i سيصبح موجودا بقيمة q للمؤثر Q في اللحظة t تعطى كمايلي:

$$\left\langle q_i,t_i\middle|q,t\right\rangle = {}_s\left\langle q_i\right|\exp\left(i\hat{H}(t-t_i)/\hbar\right)\left|q\right\rangle_s \tag{15}$$

We start by dividing the time interval between the initial t_i and final time t by inserting the intermediate ime t_1. The wave function is first propagated until t_1, in a first step, and then until final time t, in a second step :

نبدأ بتقسيم المجال الزمني بين اللحظة الابتدائية t_i و الزمن النهائ t بإدخال الزمني الوسيطي t_1. دالة الموجة أولا تنتشر حتى t_1 كمرحلة أولى ثم حتى t في المرحلة الثانية:

$$\Psi(x_1,t_1) = \int K(x_1,t_1,x_i,t_i)\Psi(x_i,t_i)dx_i \tag{16}$$

And

$$\Psi(x,t) = \int K(x,t,x_1,t_1)\Psi(x_1,t_1)dx_1 \tag{17}$$

We combined these two equations we obtain :

نركب بين هاتين المعادلتين فنجد:

$$\Psi(x,t) = \int K(x,t,x_1,t_1)K(x_1,t_1,x_i,t_i)\Psi(x_i,t_i)dx_i dx_1 \tag{18}$$

Which allows us to get the following interesting result:

مما يسمح بإيجاد النتيجة التالية:

$$K(x,t,x_i,t_i) = \int K(x,t,x_1,t_1)K(x_1,t_1,x_i,t_i)dx_1 \tag{19}$$

Allowing conclude that the transition from (x_i,t_i) to (x,t) as a result of a transition from first (x_i,t_i) to all possible intermediate points (x_1,t_1), which is then followed by a transition from these points (x_1,t_1) to the final point (x,t).

يسمح باستنتاج ان الانتقال من (x_i,t_i) الى (x,t) يكون نتيجة لانتقال أولا من (x_i,t_i) عبر كل النقاط الوسيطية (x_1,t_1) التي تسمح باعتمادها كمبدا جديد للانتقال نحو النقطة النهائية (x,t).

We now dividing the time interval from t_i and final time t into $N+1$ small steps of equal length ε, with :

الان نقسم المجال الزمني بين t_i و الزمن النهائ t الى $N+1$ من القطع الصغيرة المتساوية الطول ε بحيث:

$$(N+1)\varepsilon = t - t_i \qquad (20)$$

Let the steps begin at $t_i, t_1, t_2, ..., t_N$. We then obtain a direct generalization of the results (19) to becomes as follows:

ليكن التصاعد الزمني $t_i, t_1, t_2, ..., t_N$. إذن نحصل على التعميم الخاص بالمعادلة 19 ليصبح كمايلي:

$$K(x,t,x_i,t_i) = \int ... \int dx_1 dx_2 .... dx_N K(x,t,x_N,t_{N1}) K(x_N,t_N,x_{N-1},t_{N-1}) .... K(x_1,t_1,x_i,t_i) \qquad (21)$$

We now calculate the elementary propagator for a small time interval $\eta = t_{j+1} - t_j$ from t_j to t_{j+1}. We apply Eq . (15) to obtain :

الان لنحسب الناشر العنصري الموافق للقطعة الصغيرة $\eta = t_{j+1} - t_j$ بين t_j الى t_{j+1}. نطبق المعادلة 15 لنجد:

$$\begin{aligned} K(x_{j+1},t_{j+1},x_j,t_j) &= \langle x_{j+1} | \exp(-i\hat{H}\eta/\hbar) | x_j \rangle \\ &\cong \langle x_{j+1} | (1 - i\hat{H}\eta/\hbar) | x_j \rangle \\ &= \langle x_{j+1} \| x_j \rangle - i\eta/\hbar \langle x_{j+1} | \hat{H} | x_j \rangle \\ &= \delta(x_{j+1} - x_j) - i\eta/\hbar \langle x_{j+1} | \hat{H} | x_j \rangle \end{aligned} \qquad (22)$$

We have

$$\delta(x_{j+1} - x_j) = \frac{1}{2\prod} \int e^{-\frac{i}{\hbar} p (x_{j+1} - x_j)} dp \qquad (23)$$

The Hamiltonian operator $\hat{H}(\hat{p},\hat{q})$ composed of two operators, the first $\hat{T}(\hat{p})$ is the kinetic energy operator while the second operator $\hat{V}(\hat{q})$ is the potential interaction :

يتكون مؤثر الهاميلتونيان $\hat{H}(\hat{p},\hat{q})$ من حدين، الأول هو مؤثر الطاقة الحركية $\hat{T}(\hat{p})$ بينما المؤثر الثاني $\hat{V}(\hat{q})$ هو كمون التفاعل:

$$\hat{H}(\hat{p},\hat{q})=\hat{T}(\hat{p})+\hat{V}(\hat{q}) \tag{24}$$

Which allows us to write the following result:

مما يتيح لنا كتابة النتيجة التالية:

$$\langle q_{j+1}|\hat{H}(\hat{p},\hat{q})|q_j\rangle=\langle q_{j+1}|\hat{T}(\hat{p})|q_j\rangle+\langle q_{j+1}|\hat{V}(\hat{q})|q_j\rangle \tag{25}$$

We now, consider the first term in Eq. (25) :

$$\langle q_{j+1}|\hat{T}(\hat{p})|q_j\rangle=\int dpdp'\langle q_{j+1}\|p'\rangle\langle p'|\hat{T}(\hat{p})|p\rangle\langle p\|q\rangle \tag{26}$$

We have introduced :

و بإدخال علاقات الأحادية:

$$\begin{aligned}\int dp|p\rangle\langle p|&=I\\ \int dp'|p'\rangle\langle p'|&=I\end{aligned} \tag{27}$$

Also, we have :

و لدينا أيضا:

$$\begin{aligned}\hat{T}(\hat{p})|p\rangle&=T(p)|p\rangle\\ |p'\rangle\langle p|&=\delta(p'-p)\end{aligned} \tag{28}$$

This allows us to write the following result:

مما يسمح لنا بكتابة النتيجة التالية:

$$\langle q_{j+1}|\hat{T}(\hat{p})|q_j\rangle=\int dp\langle q_{j+1}|T(p)\langle p\|q\rangle \tag{29}$$

On the other hand, we have :

و من جهة أخرى لدينا:

$$\langle p\|q\rangle=\frac{1}{\sqrt{2\prod\hbar}}e^{-\frac{i}{\hbar}pq} \tag{30}$$

Thus the equation 29 becomes a as follows :

و بالتالي تصبح المعادلة رقم 29 على الشكل التالي:

$$\left\langle q_{j+1}\middle|\hat{T}(\hat{p})\middle|q_j\right\rangle = \frac{1}{2\prod\hbar}\int T(p)e^{-\frac{i}{\hbar}p(q_{j+1}-q_j)}dp \tag{31}$$

Homework 3

Show the second term in Eq. (25) $\left\langle q_{j+1}\middle|\hat{V}(\hat{q})\middle|q_j\right\rangle$, can be expressed as follows :

بين ان الحد الثاني من المعادلة رقم 25 $\left\langle q_{j+1}\middle|\hat{V}(\hat{q})\middle|q_j\right\rangle$ يمكن التعبير عنه كمايلي:

$$\left\langle q_{j+1}\middle|\hat{V}(\hat{q})\middle|q_j\right\rangle = \frac{1}{2\prod\hbar}\int V(q_j)e^{\frac{i}{\hbar}p(q_{j+1}-q_j)}dp \tag{32}$$

Now, we compained between the two Eqs. (31) and (32) to obtain the elementary propagator as follows :

الآن ، قمنا بتجميع بين المعادلات. (31) و (32) للحصول على الناشر اللعنصري على النحو التالي:

$$K(q_{j+1},t_{j+1},q_j,t_j) = \underset{\eta\to 0}{Lim}\frac{1}{2\prod\hbar}\int dp_j V(q_j)\exp\left\{\frac{i}{\hbar}\left[p_j(q_{j+1}-q_j)-\eta H(p_j,q_j)\right]\right\} \tag{33}$$

In the above equation $H(p_j,q_j)$ is just a function of the variables (p_j,q_j) and doesn't represent an operator. We now insert Eq. (32) which present the elementary propagator into Eq. (21) to obtain the propagator:

في المعادلة أعلاه $H(p_j,q_j)$ هي مجرد دالة للمتغيرات (p_j,q_j) ولا تمثل مؤثر. نقوم الآن بإدخال المعادلة (32) التي تعبر عن الناشر العنصري في المعادلة (21) للحصول على الناشر:

$$K(q,t,q_i,t_i) = \underset{N\to 0}{Lim}\int\prod_{k=1}^{N}dq_k\int\prod_{l=1}^{N}\frac{dp_l}{2\prod\hbar}\exp\left\{\frac{i}{\hbar}\sum_{j=1}^{N}\left[p_j(q_{j+1}-q_j)-\eta H(p_j,q_j)\right]\right\} \tag{34}$$

In the limit $N\to+\infty$, for the exponent we obtain :

عند إجراء النهاية $N\to+\infty$ نحصل على الأس:

$$\begin{aligned}\sum_{j=1}^{N}\left[p_j(q_{j+1}-q_j)-\eta H(p_j,q_j)\right] &= \sum_{j=1}^{N}\eta\left[p_j\left(\frac{q_{j+1}-q_j}{\eta}\right)-H(p_j,q_j)\right]\\ &\xrightarrow[\mathrm{N}\to+\infty]{}\int_{t_i}^{t}dt'\left[p(t')-H\left(p(t'),q(t')\right)\right]\end{aligned} \tag{35}$$

Which allows us to rewrite the propagator to the new form :

مما يتيح لنا إعادة كتابة الناشربالشكل الجديد:

$$K(q,t,q_i,t_i)=\int D_q \int D_p \exp\left\{\frac{i}{\hbar}\int_{t_i}^{t} dt'\left[p(t')-H(p(t'),q(t'))\right]\right\} \tag{34}$$

Here $D_q \equiv \prod_{k=1}^{N} dq_k$ and $D_p \equiv \prod_{l=1}^{N} \frac{dp_l}{2\prod\hbar}$.

For the special case, in which the Hamiltonian function $H(p(t'),q(t'))$ depends only quadratically on variable $p(t')$:

و بمعالجة الحالة الخاصة:

$$H(p,q)=\frac{p^2}{2m}+V(q) \tag{35}$$

We combined the Eqs. (35) and (34) to find easily the expression

قمنا بدمج المعادلاتين (35) و (34) لنجد بسهولة:

$$K(q,t,q_i,t_i)=\underset{N\to 0}{Lim}\int\prod_{k=1}^{N} dq_k \int\prod_{l=1}^{N}\frac{dp_l}{2\prod\hbar}\exp\left\{\frac{i}{\hbar}\eta\sum_{j=1}^{N}\left[p_j\left(\frac{q_{j+1}-q_j}{\eta}\right)-\frac{p_j^2}{2m}+V(q_j)\right]\right\} \tag{36}$$

Homework 4

Apply the special integral relation :

و باستخدام علاقة التكامل الخاصة :

$$\int_{-\infty}^{+\infty}\exp\left(-ap^2+bp+c\right)dp=\sqrt{\frac{\prod}{a}}\exp\left(\frac{b^2}{4a}+c\right) \tag{37}$$

Show that the propagator expressed, in Eq. (36), will be in the following form :

بين أن الناشر المعبر عنه في المعادلة 36 سيكون كمايلي:

$$K(q,t,q_i,t_i)=N\int D_q \exp\left\{\frac{i}{\hbar}S(q(t'))\right\} \tag{38}$$

Here N represents the factor and the classical action $S(q(t'))$ is given by :

هنا N تمثل معامل و الفعل الكلاسيكي $S(q(t'))$ يعطى كمايلي:

$$S(q(t')) = \int_{t_i}^{t} dt' \, L\left(\frac{dq(t')}{dt}, q(t')\right) \tag{39}$$

And

$$L\left(\frac{dq(t')}{dt}, q(t')\right) = \frac{m}{2}\left(\frac{dq(t')}{dt}\right)^2 - V(q) \tag{40}$$

Homework 5

For free particle, we have $V(q)=0$, thus the propagator reduced to the following expression :

من أجل الجسم الحر $V(q)=0$ و بالتالي يختصر الناشر للعبارة التالية:

$$\begin{aligned} K_0(q,t,q_i,t_i) &= N\int D_q \exp\left\{\frac{i}{\hbar} S_0(q(t'))\right\} \\ &= \underset{N\to 0}{Lim}\left(\frac{m}{2\prod i\hbar\eta}\right)^{\frac{N+1}{2}} \int \prod_{k=1}^{N} dq_k \exp\left\{\frac{i}{\hbar}\eta\sum_{j=1}^{N}\frac{m}{2}\left(\frac{q_{j+1}-q_j}{\eta}\right)\right\} \end{aligned} \tag{41}$$

Apply the special integral relation

و باستخدام علاقة التكامل الخاصة:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dq_1 \ldots dq_N \exp\left(i\lambda\left[(q_1-a)^2 + (q_2-q_1)^2 + \ldots(b-q_N)^2\right]\right) = \left(\frac{i^N \prod^N}{(N+1)\lambda^N}\right) \exp\left(\frac{i\lambda}{N+1}(b-a)^2\right) \tag{42}$$

To find the free propagator, in the coordinates space, expressed in the following form :

لايجاد الناشر الحر في فضاء الاحداثيات كمايلي:

$$K(q,t,q_i,t_i) = \left(\frac{m}{2\prod i\hbar(t-t_i)}\right)^{1/2} \exp\left(\frac{i}{\hbar}\frac{m(\Delta q)^2}{2\Delta t}\right) \tag{43}$$

where $\Delta t = t - t_i$ and $\Delta q = q - q_i$. In the momentum representation, the free propagator expressed as follows :

حيث أن $\Delta t = t - t_i$ و $\Delta q = q - q_i$. في فضاء كمية الحركة يمكن التعبير عن الناشر كمايلي:

$$K_0(p,\Delta t)=\int e^{-\frac{i}{\hbar}p\Delta q}K_0(\Delta q,\Delta t)d\Delta q$$
$$=\frac{1}{\sqrt{2\prod\hbar}}\left(\frac{m}{2\prod i\hbar\Delta t}\right)^{1/2}\int \exp\left(-\frac{i}{\hbar}p\Delta q\right)\exp\left(\frac{i}{\hbar}\frac{m(\Delta q)^2}{2\Delta t}\right)d\Delta q \tag{44}$$

Apply the special integral relation

و باستخدام علاقة التكامل الخاصة :

$$\int_{-\infty}^{+\infty} d\Delta q \exp\left(-a(\Delta q)^2+b\Delta q\right)=\sqrt{\frac{\prod}{a}}\exp\left(\frac{b^2}{4a}\right) \tag{45}$$

To find the free propagator expressed in Eq. (43) will be in the following form :

لايجاد الناشر الحرالمعبر عنه في المعادلة 43 الذي يصبح بالشكل التالي

$$K_0(p,\Delta t)=\frac{1}{\sqrt{2\prod\hbar}}\exp\left(-\frac{i}{\hbar}\frac{p^2}{2m}\Delta t\right) \tag{49}$$

Allows reading of the eigenvalues of free particle :

مما يسمح بقراءة القيم الذاتية للجسم الحر

$$E=\frac{p^2}{2m} \tag{50}$$

This is, of course, the expected result.

و هي نتيجة متوقعة بطبيعة الحال

Wait for the second chapter soon

انتظرو الفصل الثاني قريبا

References

1-Richard Mackenzie, Path Integral Methods and Applications, arXiv:quanta-ph/0004090v1 24 Apr 2000.

2-R. P. Feynman and A. R. Hibbs, Quantum mechanics and Path integral, McGraw-Hill, 1965.

3-D. Bailin and A. Love, Introduction to Gauge Field Theory, IOP Publishing Limited 1993. ISBN 0-85274-817-5. England.

4- S. Gradshteyn and I. M. Ryzhik, Table of Integrals, Series and Products, 7th. ed.: eds. Alan Jeffrey Daniel Zwillinger (Elsevier, 2007).

5-Dick R. (2012) Non-relativistic Quantum Field Theory. In: Advanced Quantum Mechanics. Graduate Texts in Physics. Springer, New York, NY. https://doi.org/10.1007/978-1-4419-8077-9_17

5-Emma Wikberg, Path Integrals in Quantum Mechanics, Department of Physics, Stockholm University, 23rd March 2006.

6-R. Rosenfelder, Path Integrals in Quantum Physics, Paul Scherrer Institute, CH-5232 Villigen PSI, Switzerland, arXiv: 1209-1315v4 /Nucl-th / 30 Jul 2017.