Enrico Borghi

PROPAGATORI

Richiami a studi presenti in “fisicarivisitata”

Leggendo “Propagatori” si incontrano richiami al seguente studio

(a) Reinterpretare l'Elettromagnetismo maxwelliano per spiegare la Meccanica quantistica - Seconda Parte

che fa parte di “fisicarivisitata” e che deve essere ben noto a chi si interessa ai propagatori seguendo la presentazione che di questo argomento viene data in questo studio.

1. *Introduzione*

Riprendiamo in considerazione la (687) dello studio (a) che qui riscriviamo:

$$\psi(x,t)=\frac{1}{\sqrt{(2\pi)^{1/2}\triangle x_0}}\frac{e^{\frac{-(x-\langle x\rangle_0-\frac{\langle p_x\rangle_0}{m_0}t)^2}{4\left((\triangle x)_0^2+i\frac{\hbar}{2m_0}t\right)}}}{\sqrt{1+i\frac{\hbar}{2m_0(\triangle x)_0^2}t}}e^{\frac{i}{\hbar}\left(\langle p_x\rangle_0 x-\frac{\langle p_x\rangle_0^2}{2m_0}t\right)} \tag{1}$$

Si tratta, come ricordiamo, della soluzione a pacchetto d'onde a indeterminazione minima ($\triangle x_0\triangle p_{x0}=\frac{1}{2}\hbar$) dell'equazione di Schrödinger per una particella libera avente massa m_0, soluzione che in forma compatta è espressa da

$$\psi(x,t)=\frac{1}{\sqrt{h}}\int\limits_{-\infty}^{+\infty}\varphi(p_x,0)e^{\frac{i}{\hbar}\left(p_x x-\frac{p_x^2}{2m_0}t\right)}dp_x \tag{2}$$

essendo $\varphi(p_x,0)$ la *ampiezza di probabilità di momento iniziale* $\varphi(p_x,0)$ espressa dalla (680) dello studio (a) che qui riscriviamo,

$$\varphi(p_x,0)=\frac{1}{\sqrt{(2\pi)^{1/2}\triangle p_{x0}}}e^{-\frac{(p_x-\langle p_x\rangle_0)^2}{4(\triangle p_x)_0^2}-\frac{i}{\hbar}\langle x\rangle_0(p_x-\langle p_x\rangle_0)} \tag{3}$$

Ci proponiamo ora di mostrare che vi è un altro modo di risolvere l'equazione di Schrödinger, un modo basato sul concetto di propagatore, che ora presenteremo, e che fa ricorso alla *ampiezza di probabilità di posizione iniziale* $\psi(x,0)$ espressa dalla (679) dello studio (a):

$$\psi(x,0)=\frac{1}{\sqrt{(2\pi)^{1/2}\triangle x_0}}e^{-\frac{(x-\langle x\rangle_0)^2}{4(\triangle x)_0^2}+\frac{i}{\hbar}\langle p_x\rangle_0 x} \tag{4}$$

Per introdurre quest'ultimo modo iniziamo col ridefinire la (2) nello spazio 3-dimensionale introducendo $\overline{\mathcal{R}}\equiv x,y,z$ e $\overline{p}\equiv p_x,p_y,p_z$ (in luogo di x e p_x) e indichiamo con t_0 l'istante iniziale (in luogo di 0) cosicché:

$$\psi\left(\overline{\mathcal{R}},t\right)=\int\limits_{-\infty}^{+\infty}\varphi(\overline{p},t_0)\frac{e^{\frac{i}{\hbar}\overline{p}\cdot\overline{\mathcal{R}}}}{h^{3/2}}e^{-\frac{i}{\hbar}\mathcal{E}(t-t_0)}d\overline{p}\quad;\quad\mathcal{E}=\frac{\overline{p}^2}{2m_0}\quad;\quad t>t_0 \tag{5}$$

Ponendo

$$u(\overline{\mathcal{R}},\overline{p})=\frac{e^{\frac{i}{\hbar}\overline{p}\cdot\overline{\mathcal{R}}}}{h^{3/2}} \tag{6}$$

si ottiene

$$\psi\left(\overline{\mathcal{R}},t\right)=\int\limits_{-\infty}^{+\infty}\varphi(\overline{p},t_0)u(\overline{\mathcal{R}},\overline{p})e^{-\frac{i}{\hbar}\mathcal{E}(t-t_0)}d\overline{p} \tag{7}$$

Ora osserviamo che per $t = t_0$ si ha:

$$\psi(\overline{\mathcal{R}}, t_0) = \int_{-\infty}^{+\infty} \varphi(\overline{p}, t_0) u(\overline{\mathcal{R}}, \overline{p}) d\overline{p}$$

Moltiplichiamo per $u^*(\overline{\mathcal{R}}, \overline{p}') = e^{-\frac{i}{\hbar}\overline{p}' \cdot \overline{\mathcal{R}}}/h^{3/2}$ e integriamo rispetto a $\overline{\mathcal{R}}$:

$$\begin{aligned}
\int_{-\infty}^{+\infty} u^*(\overline{\mathcal{R}}, \overline{p}')\psi(\overline{\mathcal{R}}, t_0) d\overline{\mathcal{R}} &= \int_{-\infty}^{+\infty} u^*(\overline{\mathcal{R}}, \overline{p}') \int_{-\infty}^{+\infty} \varphi(\overline{p}, t_0) u(\overline{\mathcal{R}}, \overline{p}) d\overline{p} d\overline{\mathcal{R}} \\
&= \int_{-\infty}^{+\infty}\int_{-\infty}^{+\infty} \varphi(\overline{p}, t_0) u^*(\overline{\mathcal{R}}, \overline{p}') u(\overline{\mathcal{R}}, \overline{p}) d\overline{p} d\overline{\mathcal{R}} \\
&= \int_{-\infty}^{+\infty}\int_{-\infty}^{+\infty} \varphi(\overline{p}, t_0) \frac{e^{\frac{i}{\hbar}\overline{\mathcal{R}}\cdot(\overline{p}-\overline{p}')}}{(2\pi)^3\hbar^3} d\overline{\mathcal{R}} d\overline{p} \\
&= \int_{-\infty}^{+\infty} \varphi(\overline{p}, t_0) \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{e^{i\frac{\overline{\mathcal{R}}}{\hbar}\cdot(\overline{p}-\overline{p}')}}{(2\pi)^3} d\frac{\overline{\mathcal{R}}}{\hbar^3} d\overline{p}
\end{aligned}$$

Ricordando una delle possibili definizioni della “funzione” δ di Dirac (v. l’eq. (N8) dell’Appendice N dello studio (a)) possiamo scrivere

$$\int_{-\infty}^{+\infty} u^*(\overline{\mathcal{R}}, \overline{p}')\psi(\overline{\mathcal{R}}, t_0) d\overline{\mathcal{R}} = \int_{-\infty}^{+\infty} \varphi(\overline{p}, t_0)\delta(\overline{p} - \overline{p}') d\overline{p} = \varphi(\overline{p}', t_0)$$

e infine, eliminando gli apici ormai inutili:

$$\varphi(\overline{p}, t_0) = \int_{-\infty}^{+\infty} u^*(\overline{\mathcal{R}}, \overline{p})\psi(\overline{\mathcal{R}}, t_0) d\overline{\mathcal{R}} \tag{8}$$

Segue dalla (7):

$$\begin{aligned}
\psi\,(\overline{\mathcal{R}}, t) &= \int_{-\infty}^{+\infty}\int_{-\infty}^{+\infty} u^*(\overline{\mathcal{R}}', \overline{p})\psi(\overline{\mathcal{R}}', t_0) u(\overline{\mathcal{R}}, \overline{p}) e^{-\frac{i}{\hbar}\mathcal{E}(t-t_0)} d\overline{p} d\overline{\mathcal{R}}' \\
&= \int_{-\infty}^{+\infty} \left\{ \int_{-\infty}^{+\infty} u(\overline{\mathcal{R}}, \overline{p}) u^*(\overline{\mathcal{R}}', \overline{p}) e^{-\frac{i}{\hbar}\mathcal{E}(t-t_0)} d\overline{p} \right\} \psi(\overline{\mathcal{R}}', t_0) d\overline{\mathcal{R}}'
\end{aligned}$$

Introduciamo il *propagatore*

$$K(\overline{\mathcal{R}}, \overline{\mathcal{R}}'; t - t_0) = \int u(\overline{\mathcal{R}}, \overline{p}) u^*(\overline{\mathcal{R}}', \overline{p}) e^{-\frac{i}{\hbar}\mathcal{E}(t-t_0)} d\overline{p} \tag{9}$$

cosicché

$$\psi\left(\overline{\mathcal{R}},t\right)=\int K(\overline{\mathcal{R}},\overline{\mathcal{R}}';t-t_0)\psi(\overline{\mathcal{R}}',t_0)d\overline{\mathcal{R}}' \tag{10}$$

La (10) mostra che, se la ψ è nota nell'istante iniziale, è possibile determinarla in qualunque istante t successivo conoscendo il propagatore del sistema fisico di cui la ψ è la funzione d'onda ed effettuando le operazioni indicate nella (10).
Il propagatore, come vedremo fra poco, soddisfa l'equazione

$$\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial t}-\mathcal{H}\right)K(\overline{\mathcal{R}},\overline{\mathcal{R}}';t-t_0)=\hbar\delta(\overline{\mathcal{R}}-\overline{\mathcal{R}}')\delta(t-t_0)\quad;\quad t>t_0 \tag{11}$$

Nel caso di una particella libera avente massa m_0 in moto unidimensionale sull'asse x si ha

$$\mathcal{H}=-\frac{\hbar^2}{2m_0}\frac{\partial^2}{\partial x^2}$$

e perciò

$$\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial t}+\frac{\hbar^2}{2m_0}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\right)K(x,x';t-t_0)=\hbar\delta(x-x')\delta(t-t_0) \tag{12}$$

ovvero, per $t\neq t_0$

$$\frac{\partial^2 K}{\partial x^2}-\frac{2m_0}{i\hbar}\frac{\partial K}{\partial t}=0 \tag{13}$$

mentre per $t=t_0$ (condizione iniziale)

$$K(x,x';0)=\delta(x-x') \tag{14}$$

La (13) è simile a una ben nota equazione della Fisica-Matematica: l'equazione monodimensionale della diffusione. Della integrazione di questa equazione ci interesseremo nella breve digressione che segue.

* * *

L'equazione monodimensionale della diffusione ha la forma seguente:

$$\frac{\partial^2 f(x,t)}{\partial x^2}-\frac{1}{k}\frac{\partial f(x,t)}{\partial t}=0\quad;\quad k=\textit{ costante}>0 \tag{15}$$

Risolverla significa determinare la $f(x,t)$ essendo nota in $t_0=0$

$$f(x,0)=f_0(x)$$

A questo fine moltiplichiamo la (15) per $e^{-i\omega x}$ e integriamo rispetto a x (trasformazione di Fourier):

$$\int e^{-i\omega x}\frac{\partial^2 f}{\partial x^2}dx-\frac{1}{k}\int e^{-i\omega x}\frac{\partial f}{\partial t}dx=0$$

Ma si può scrivere:

$$\int e^{-i\omega x}\frac{\partial}{\partial x}\frac{\partial f}{\partial x}dx=\int\frac{\partial}{\partial x}\left(e^{-i\omega x}\frac{\partial f}{\partial x}\right)dx-\int\frac{\partial e^{-i\omega x}}{\partial x}\frac{\partial f}{\partial x}dx$$

Il primo integrale a membro destro può essere trasformato mediante il Teorema di Gauss in un integrale di superficie su cui l'integrando, assumendo che la f si comporti con opportuna regolarità, si annulla. Rimane così:

$$\int e^{-i\omega x}\frac{\partial}{\partial x}\frac{\partial f}{\partial x} = i\omega\int e^{-i\omega x}\frac{\partial f}{\partial x}dx = i\omega\int\frac{\partial(e^{-i\omega x}f)}{\partial x}dx - i\omega\int f\frac{\partial e^{-i\omega x}}{\partial x}dx$$

Applicando nuovamente il Teorema di Gauss al primo integrale a membro destro si ottiene infine

$$\int e^{-i\omega x}\frac{\partial}{\partial x}\frac{\partial f}{\partial x}dx = i^2\omega^2\int e^{-i\omega x}f dx$$

Segue

$$-\omega^2\int e^{-i\omega x}f dx - \frac{1}{k}\frac{\partial}{\partial t}\int e^{-i\omega x}f dx = 0 \tag{16}$$

Mettendo in evidenza l'operazione di trasformazione di Fourier che abbiamo effettuato sulla (15) si può scrivere

$$F(\omega,t) = \int e^{-i\omega x}f(x,t)dx \quad ; \quad F_0(\omega) = \int e^{-i\omega x}f_0(x)dx$$

e quindi la (16) diviene la seguente equazione alle derivate non più parziali

$$-\omega^2 F - \frac{1}{k}\frac{dF}{dt} = 0$$

che si integra facilmente

$$F(\omega,t) = F_0(\omega)e^{-k\omega^2 t} = \int e^{-i\omega x}f_0(x)e^{-k\omega^2 t}dx$$

Ora antitrasformiamo questa espressione moltiplicando per $e^{i\omega x}$ e integrando rispetto a ω:

$$f(x,t) = \frac{1}{2\pi}\iint e^{i\omega x}e^{-i\omega\xi}f_0(\xi)e^{-k\omega^2 t}d\omega d\xi = \frac{1}{2\pi}\iint f_0(\xi)e^{i\omega(x-\xi)-k\omega^2 t}d\omega d\xi$$

Ma

$$\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-a^2\rho^2+ib\rho}d\rho = \frac{\sqrt{\pi}}{a}e^{-\frac{b^2}{4a^2}} \tag{17}$$

cosicché assumendo $\rho = \omega$, $a = \sqrt{kt}$ e $b = x - \xi$ si ottiene:

$$\int e^{-k\omega^2 t}e^{i\omega(x-\xi)}d\omega = \sqrt{\frac{\pi}{kt}}e^{-\dfrac{(x-\xi)^2}{4kt}}$$

perciò

$$f(x,t) = \frac{1}{\sqrt{4\pi kt}}\int f_0(\xi)e^{-\dfrac{(x-\xi)^2}{4kt}}d\xi \tag{18}$$

Questa è la soluzione dell'equazione della diffusione che ci eravamo proposti di determinare.

* * *

Nel caso del propagatore la condizione iniziale è

$$f_0(\xi) = \delta(\xi - x') \tag{19}$$

e $k = i\hbar/2m_0$ perciò la (18) diviene

$$K(x, x'; t) = \sqrt{\frac{m_0}{2\pi i\hbar t}} \int \delta(\xi - x') e^{\frac{i}{\hbar}\frac{m_0(x-\xi)^2}{2t}} d\xi$$

da cui

$$K(x, x'; t) = \sqrt{\frac{m_0}{2\pi i\hbar t}} e^{\frac{i}{\hbar}\frac{m_0(x-x')^2}{2t}} \quad ; \quad [K] = L^{-1} \tag{20}$$

e quindi la (10) con $\psi(x', 0)$ espressa dalla (4) diviene

$$\psi(x, t) = \int K(x, x'; t)\psi(x', 0)dx' = \frac{\sqrt{\frac{m_0}{2\pi i\hbar t}}}{\sqrt{(2\pi)^{1/2}\triangle x_0}} \int e^{\frac{i}{\hbar}\frac{m_0(x-x')^2}{2t}} e^{-\frac{(x'-\langle x\rangle_0)^2}{4(\triangle x)_0^2} + \frac{i}{\hbar}\langle p_x\rangle_0 x'} dx' \tag{21}$$

Nel caso più generale di una particella libera in movimento nello spazio tridimensionale si ottiene per il propagatore (9) l'espressione seguente

$$K(\overline{\mathcal{R}}, \overline{\mathcal{R}}'; t - t_0) = \left(\frac{m_0}{2\pi i\hbar(t - t_0)}\right)^{3/2} e^{\frac{i}{\hbar}\frac{m_0(\overline{\mathcal{R}}-\overline{\mathcal{R}}')^2}{2(t-t_0)}} \tag{22}$$

che, come la versione monodimensionale, descrive sia la propagazione nel futuro sia la propagazione nel passato.

* * *

Dalla (1) si ricava la densità di probabilità della posizione della particella libera

$$\psi^*(x, t)\psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sqrt{(\triangle x)_0^2 + \frac{\hbar^2}{4(\triangle x)_0^2 m_0^2}t^2}} e^{\frac{-(x-\langle x\rangle_0 - \frac{\langle p_x\rangle_0}{m_0}t)^2}{2\left((\triangle x)_0^2 + \frac{\hbar^2}{4(\triangle x)_0^2 m_0^2}t^2\right)}} \tag{23}$$

La (23) è una gaussiana il cui centro, che in $t = 0$ si trova in $\langle x\rangle_0$, si sposta nel verso delle x crescenti con velocità costante $\langle p_x\rangle_0/m_0$. La sua deviazione standard cresce col tempo:

$$\triangle x_t = \sqrt{(\triangle x)_0^2 + \frac{\hbar^2}{4(\triangle x)_0^2 m_0^2}t^2} \tag{24}$$

È interessante farsi un'idea del tempo necessario a $\triangle x_0$ per raggiungere una certa ampiezza $\triangle x_t$. Ad esempio per arrivare a un'ampiezza $\triangle x_t = 2\triangle x_0$ occorre un tempo ricavabile da

$$\frac{\hbar^2}{4(\triangle x)_0^2 m_0^2}t^2 = 3(\triangle x)_0^2 \tag{25}$$

da cui

$$t = 2\sqrt{3}\frac{m_0(\triangle x)_0^2}{\hbar} \tag{26}$$

Per valori di m_0 e di $\triangle x_0$ corrispondenti a corpi di dimensioni ordinarie t assume un valore enorme, cosicché le conseguenze del processo espresso dalla (23) non sono praticamente osservabili. Ad esempio, se $m_0 = 10^{-3}g$ e $\triangle x_0 = 10^{-3}cm$ si ha $t = 3,3 \cdot 10^{18}sec = 0,317 \cdot 10^{11}anni$.
Se però consideriamo un elettrone e supponiamo che $\triangle x_0$ rappresenti una dimensione atomica, cioè dell'ordine dell'angstrom ($10^{-8}cm$), allora risulta $t \approx 10^{-16}sec$ e il processo (24) è rapidissimo.
Notiamo anche che se $\triangle x_0 \to 0$, allora anche $t \to 0$ il che significa che il processo è di tipo che si potrebbe definire esplosivo.
Queste considerazioni ci aiutano a chiarire il significato di alcuni aspetti del dispositivo sperimentale di Stern e Gerlach (v. lo studio "Esperimento di Stern-Gerlach; spin dell'elettrone").
Ricordiamo che fra le estremità polari del magnete è stato inviato non un fascio di elettroni ma un fascio di atomi elettricamente neutri per evitare che la deflessione osservata fosse dovuta alla forza di Lorentz sugli elettroni. Ora possiamo aggiungere che la massa di ogni atomo è tale da garantire che la deviazione standard espressa dalla (24) cresce nel tempo in modo sufficientemente lento da non dare origine a interferenza quantistica. In altre parole, se ognuno degli elettroni che attraversano il dispositivo di Stern e Gerlach rimane legato a un atomo, la massa dell'atomo è tale che il gruppo d'onde associato non si espande sensibilmente cosicché sullo schermo di raccolta a valle del magnete si possono osservare due macchie luminose ben distinte perché non coperte da effetti di interferenza.

2. Propagatori in presenza di un potenziale

Riprendiamo dal par. 1 il concetto di propagatore, che in questo par. 2 verrà presentato in modo da poter essere associato a una particella dotata di energia potenziale, mentre, come ricordiamo, nel par. 1 il concetto di propagatore è stato presentato in associazione con una particella libera.
Consideriamo una particella avente massa m_0 e dotata di energia potenziale $\mathcal{V}(\overline{\mathcal{R}}, t)$ e indichiamo con $|\chi(t_0)\rangle$ il suo vettore di stato nell'istante t_0. Riprendiamo in esame la (A2) dell'Appendice A che qui riscriviamo

$$|\chi(t)\rangle = T_S(t, t_0)|\chi(t_0)\rangle \tag{27}$$

A membro destro abbiamo due quantità note: il vettore di stato iniziale $|\chi(t_0)\rangle$ e l'operatore $T_S(t, t_0)$ che è definito dall'eq. (A9) dell'Appendice A, nella quale viene mostrato come può essere ottenuto se si conosce l'hamiltoniano della particella.
Rappresentiamo la (27) nella base $|\overline{\mathcal{R}}\rangle$ delle coordinate:

$$\langle\overline{\mathcal{R}}|\chi(t)\rangle = \langle\overline{\mathcal{R}}|T_S(t, t_0)|\chi(t_0)\rangle$$

Inseriamo in questa equazione la relazione di completezza della base $|\overline{\mathcal{R}}\rangle$ espressa dalla (858) dello studio (a) che qui riscriviamo nel modo seguente:

$$\int |\overline{\mathcal{R}}'\rangle\langle\overline{\mathcal{R}}'|d\overline{\mathcal{R}}' = \mathbb{1} \tag{28}$$

ottenendo così

$$\langle\overline{\mathcal{R}}|\chi(t)\rangle = \int \langle\overline{\mathcal{R}}|T_S(t, t_0)|\overline{\mathcal{R}}'\rangle\langle\overline{\mathcal{R}}'|\chi(t_0)\rangle d\overline{\mathcal{R}}' \tag{29}$$

Definiamo *propagatore* l'espressione

$$\mathcal{K}\big[\,\overline{\mathcal{R}}, t; \overline{\mathcal{R}}', t_0|\mathcal{V}(\overline{\mathcal{R}}, t)\big] = i\langle\overline{\mathcal{R}}|T_S(t, t_0)|\overline{\mathcal{R}}'\rangle \tag{30}$$

dove, facendo uso di parentesi quadre e di un separatore, si è messo in evidenza il fatto che $\mathcal{K}$ dipende funzionalmente dall'energia potenziale $\mathcal{V}(\overline{\mathcal{R}}, t)$ attraverso l'operatore T_S.
Tenendo conto della (30) si può scrivere la (29) nel modo seguente:

$$\psi\,(\overline{\mathcal{R}}, t) = -i\int \mathcal{K}\big[\,\overline{\mathcal{R}}, t; \overline{\mathcal{R}}', t_0|\mathcal{V}(\overline{\mathcal{R}}, t)\big]\psi(\overline{\mathcal{R}}', t_0)d\overline{\mathcal{R}}' \quad ; \quad t > t_0 \tag{31}$$

Il propagatore $\mathcal{K}$ propaga la ψ da t_0 a t.

Teniamo presente che il propagatore agisce a partire da t_0 ed è nullo negli istanti precedenti, cioè

$$\mathcal{K} = 0 \quad per\ t < t_0 \tag{32}$$

perciò occorre definirlo in questo modo

$$\mathcal{K}\big[\,\overline{\mathcal{R}}, t; \overline{\mathcal{R}}', t_0|\mathcal{V}\big] \rightarrow \theta(t-t_0)\mathcal{K}\big[\,\overline{\mathcal{R}}, t; \overline{\mathcal{R}}', t_0|\mathcal{V}\big] = i\theta(t-t_0)\langle\overline{\mathcal{R}}|T_S(t, t_0)|\overline{\mathcal{R}}'\rangle \tag{33}$$

dove $\theta(t-t_0)$ è la funzione a gradino che, come è noto, è nulla per $t < t_0$.

Il propagatore $\mathcal{K}$ soddisfa le seguenti equazioni:

$$\left\{-i\hbar\frac{\partial}{\partial t}-\frac{\hbar^2}{2m_0}\nabla^2_{\mathcal{R}}+\mathcal{V}\left(\overline{\mathcal{R}},t\right)\right\}\mathcal{K}\left[\overline{\mathcal{R}},t;\overline{\mathcal{R}}',t_0|\mathcal{V}\left(\overline{\mathcal{R}},t\right)\right]=\hbar\delta(t-t_0)\delta(\overline{\mathcal{R}}-\overline{\mathcal{R}}') \tag{34}$$

$$\mathcal{K}\left[\overline{\mathcal{R}},t;\overline{\mathcal{R}}',t_0|\mathcal{V}(\overline{\mathcal{R}}',t_0)\right]\left\{i\hbar\frac{\partial}{\partial t_0}-\frac{\hbar^2}{2m_0}\nabla^2_{\mathcal{R}'}+\mathcal{V}(\overline{\mathcal{R}}',t_0)\right\}=\hbar\delta(t-t_0)\delta(\overline{\mathcal{R}}-\overline{\mathcal{R}}') \tag{35}$$

La (34), come ora mostreremo, si ottiene dall'equazione di Schrödinger nel ket $|\chi(t)\rangle$ espressa dalla (A10) dell'Appendice A che qui riscriviamo

$$i\hbar\frac{d|\chi(t)\rangle}{dt}=\mathcal{H}_S(t)|\chi(t)\rangle$$

In questa sostituiamo $|\chi(t)\rangle$ con $T_S(t,t_0)|\chi(t_0)\rangle$ (v. eq. (A2) dell'Appendice A) cosicché

$$\mathcal{H}_S(t)T_S(t,t_0)=i\hbar\frac{\partial T_S(t,t_0)}{\partial t} \tag{36}$$

e, dopo aver rappresentato la (36) nelle coordinate, moltiplichiamo per $i\theta(t-t_0)$:

$$i\theta(t-t_0)\langle\overline{\mathcal{R}}|\mathcal{H}_ST_S|\overline{\mathcal{R}}'\rangle=i\theta(t-t_0)i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\langle\overline{\mathcal{R}}|T_S|\overline{\mathcal{R}}'\rangle \tag{37}$$

ovvero

$$\begin{aligned}i\theta(t-t_0)\langle\overline{\mathcal{R}}|\mathcal{H}_ST_S|\overline{\mathcal{R}}'\rangle&=i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Big\{i\theta(t-t_0)\langle\overline{\mathcal{R}}|T_S|\overline{\mathcal{R}}'\rangle\Big\}-i\hbar\frac{\partial\left\{i\theta(t-t_0)\right\}}{\partial t}\langle\overline{\mathcal{R}}|T_S|\overline{\mathcal{R}}'\rangle\\&=i\hbar\frac{\partial\mathcal{K}}{\partial t}+\hbar\frac{\partial\theta(t-t_0)}{\partial t}\langle\overline{\mathcal{R}}|T_S(t,t_0)|\overline{\mathcal{R}}'\rangle\end{aligned} \tag{38}$$

Ora teniamo conto del fatto che la derivata di una funzione a gradino è la funzione δ di Dirac, la quale rende nullo il secondo termine a membro destro per ogni t salvo che per $t=t_0$. Segue

$$i\theta(t-t_0)\langle\overline{\mathcal{R}}|\mathcal{H}_ST_S|\overline{\mathcal{R}}'\rangle=i\hbar\frac{\partial\mathcal{K}}{\partial t}+\hbar\delta(t-t_0)\langle\overline{\mathcal{R}}|T_S(t_0,t_0)|\overline{\mathcal{R}}'\rangle \tag{39}$$

Se allora ricordiamo l'espressione di $\langle\overline{\mathcal{R}}|\mathcal{H}_S$ (v. eq. (933) dello studio (a)) che qui riscriviamo

$$\langle\overline{\mathcal{R}}|\mathcal{H}_S=\mathcal{H}_S\langle\overline{\mathcal{R}}|=\left(-\frac{\hbar^2}{2m_0}\nabla^2_{\mathcal{R}}+\mathcal{V}(\overline{\mathcal{R}},t)\right)\langle\overline{\mathcal{R}}|$$

e la (856) dello studio (a) cioè

$$\langle\overline{\mathcal{R}}|T_S(t_0,t_0)|\overline{\mathcal{R}}'\rangle=\langle\overline{\mathcal{R}}|\mathbb{1}|\overline{\mathcal{R}}'\rangle=\delta(\overline{\mathcal{R}}-\overline{\mathcal{R}}')$$

otteniamo dalla (39)

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m_0}\nabla^2_{\mathcal{R}}+\mathcal{V}(\overline{\mathcal{R}},t)\right)i\theta(t-t_0)\langle\overline{\mathcal{R}}|T_S|\overline{\mathcal{R}}'\rangle=i\hbar\frac{\partial\mathcal{K}}{\partial t}+\hbar\delta(t-t_0)\delta(\overline{\mathcal{R}}-\overline{\mathcal{R}}')$$

ovvero

$$-i\hbar\frac{\partial\mathcal{K}}{\partial t}+\left(-\frac{\hbar^2}{2m_0}\nabla^2_{\mathcal{R}}+\mathcal{V}(\overline{\mathcal{R}},t)\right)i\theta(t-t_0)\langle\overline{\mathcal{R}}|T_S|\overline{\mathcal{R}}'\rangle=\hbar\delta(t-t_0)\delta(\overline{\mathcal{R}}-\overline{\mathcal{R}}')$$

che è uguale alla (34) se si tiene conto della definizione di propagatore (v. eq. (33)).
La (35) si ricava con procedimento simile dalla equazione di Schrödinger nel bra $\langle\chi(t)|$ espressa dalla (A11) dell'Appendice A che qui riscriviamo

$$-i\hbar\frac{d\langle\chi(t)|}{dt}=\langle\chi(t)|\mathcal{H}_S(t)$$

In questa, per ricavare la (35), occorre sostituire t con t_0 e $\langle\chi(t_0)|$ con $\langle\chi(t)|T_S^\dagger(t_0,t)=\langle\chi(t)|T_S^{-1}(t_0,t)=\langle\chi(t)|T_S(t,t_0)$ in accordo con l'eq. (A14) dell'Appendice A ottenendo così:

$$T_S(t,t_0)\mathcal{H}(t_0)=-i\hbar\frac{\partial T_S(t,t_0)}{\partial t_0} \tag{40}$$

che è la corrispondente della (36).

* * *

Si usa introdurre

$$S_{\mathcal{R}}=-i\hbar\frac{\partial}{\partial t}-\frac{\hbar^2}{2m_0}\nabla^2_{\mathcal{R}} \quad ; \quad S_{\mathcal{R}'}=i\hbar\frac{\partial}{\partial t_0}-\frac{\hbar^2}{2m_0}\nabla^2_{\mathcal{R}'} \tag{41}$$

perciò le (34) e (35) si possono scrivere anche così:

$$\left\{S_{\mathcal{R}}+\mathcal{V}\left(\overline{\mathcal{R}},t\right)\right\}\mathcal{K}\left[\overline{\mathcal{R}},t;\overline{\mathcal{R}}',t_0|\mathcal{V}\left(\overline{\mathcal{R}},t\right)\right]=\hbar\delta(t-t_0)\delta(\overline{\mathcal{R}}-\overline{\mathcal{R}}') \tag{42}$$

$$\mathcal{K}\left[\overline{\mathcal{R}},t;\overline{\mathcal{R}}',t_0|\mathcal{V}(\overline{\mathcal{R}}',t_0)\right]\left\{S_{\mathcal{R}'}+\mathcal{V}(\overline{\mathcal{R}}',t_0)\right\}=\hbar\delta(t-t_0)\delta(\overline{\mathcal{R}}-\overline{\mathcal{R}}') \tag{43}$$

Notiamo che l'operatore $\left\{S_{\mathcal{R}}+\mathcal{V}\left(\overline{\mathcal{R}},t\right)\right\}$ agisce su ciò che si trova alla sua destra, mentre $\left\{S_{\mathcal{R}'}+\mathcal{V}(\overline{\mathcal{R}}',t_0)\right\}$ agisce su ciò che si trova alla sua sinistra.

* * *

Il concetto di propagatore era già stato introdotto con l'equazione (9). Quell'equazione è un caso particolare della (30) corrispondente a $\mathcal{V}=0$ (particella libera) e $T_S(t,t_0)=e^{-\frac{i}{\hbar}\mathcal{E}(t-t_0)}$ (v. eq. (A30) dell'Appendice A). Infatti inserendo la relazione di chiusura $\int|\overline{p}\rangle\langle\overline{p}|d\overline{p}=\mathbb{1}$ si ottiene

$$\begin{aligned}\mathcal{K}\left[\overline{\mathcal{R}},t;\overline{\mathcal{R}}',t_0|0\right]&=i\langle\overline{\mathcal{R}}|e^{-\frac{i}{\hbar}\mathcal{E}(t-t_0)}|\overline{\mathcal{R}}'\rangle\\&=i\int\langle\overline{\mathcal{R}}|e^{-\frac{i}{\hbar}\mathcal{E}(t-t_0)}|\overline{p}\rangle\langle\overline{p}|\overline{\mathcal{R}}'\rangle d\overline{p}\\&=i\int\langle\overline{\mathcal{R}}|\overline{p}\rangle\langle\overline{\mathcal{R}}'|\overline{p}\rangle^*e^{-\frac{i}{\hbar}\mathcal{E}(t-t_0)}d\overline{p}\\&=i\int\frac{1}{h^{3/2}}e^{\frac{i}{\hbar}\overline{\mathcal{R}}\cdot\overline{p}}\frac{1}{h^{3/2}}e^{-\frac{i}{\hbar}\overline{\mathcal{R}}'\cdot\overline{p}}e^{-\frac{i}{\hbar}\mathcal{E}(t-t_0)}d\overline{p}\\&=i\int u(\overline{\mathcal{R}},\overline{p})u^*(\overline{\mathcal{R}}',\overline{p})e^{-\frac{i}{\hbar}\mathcal{E}(t-t_0)}d\overline{p}\end{aligned}$$

e si vede che si è ottenuta la (9) a parte la presenza dell'unità immaginaria i, che è stata introdotta nella definizione (30) in vista dell'uso che dei propagatori verrà fatto più avanti. Esplicitando si ottiene:

$$\begin{aligned}\mathcal{K}[\overline{\mathcal{R}},t;\overline{\mathcal{R}}',t_0|0] = i\langle\overline{\mathcal{R}}|e^{-\frac{i}{\hbar}\mathcal{E}(t-t_0)}|\overline{\mathcal{R}}'\rangle &= i\int\langle\overline{\mathcal{R}}|\overline{p}\rangle\langle\overline{p}|e^{-\frac{i}{\hbar}\mathcal{E}(t-t_0)}|\overline{\mathcal{R}}'\rangle d\overline{p} \\ &= i\int\langle\overline{\mathcal{R}}|\overline{p}\rangle\langle\overline{\mathcal{R}}'|\overline{p}\rangle^* e^{-\frac{i}{\hbar}\mathcal{E}(t-t_0)}d\overline{p} \\ &= \frac{i}{h^3}\int e^{\frac{i}{\hbar}\overline{p}\cdot\overline{\mathcal{R}}}e^{-\frac{i}{\hbar}\overline{p}\cdot\overline{\mathcal{R}}'}e^{-\frac{i}{\hbar}\mathcal{E}(t-t_0)}d\overline{p}\end{aligned}$$

e quindi, scrivendo più semplicemente $\mathcal{K}(\overline{\mathcal{R}}-\overline{\mathcal{R}}',t-t_0)$ in luogo di $\mathcal{K}[\overline{\mathcal{R}},t;\overline{\mathcal{R}}',t_0|0]$

$$\mathcal{K}[\overline{\mathcal{R}}-\overline{\mathcal{R}}',t-t_0) = \frac{i}{h^3}\int e^{\frac{i}{\hbar}\overline{p}\cdot(\overline{\mathcal{R}}-\overline{\mathcal{R}}')}e^{-\frac{i}{\hbar}\mathcal{E}(t-t_0)}d\overline{p} \quad ; \quad \mathcal{E}=\frac{\overline{p}^2}{2m_0} \tag{44}$$

La (44), oltre che *propagatore per una particella libera*, è detta anche *funzione di Green per l'equazione libera di Schrödinger* perché è la soluzione dell'equazione

$$\left\{-i\hbar\frac{\partial}{\partial t}-\frac{\hbar^2}{2m_0}\nabla^2_{\mathcal{R}}\right\}\mathcal{K}(\overline{\mathcal{R}}-\overline{\mathcal{R}}',t-t_0) = \hbar\delta(t-t_0)\delta(\overline{\mathcal{R}}-\overline{\mathcal{R}}') \tag{45}$$

corrispondente alla (34) calcolata per $\mathcal{V}=0$.

*   *   *

• Osserviamo che per $t=t_0$ si ha (v. eq. (N8) dell'Appendice N dello studio (a)):

$$\mathcal{K}(\overline{\mathcal{R}}-\overline{\mathcal{R}}',t-t_0)_{t=t_0} = \frac{i}{(2\pi)^3}\int e^{i\frac{\overline{p}}{\hbar}\cdot(\overline{\mathcal{R}}-\overline{\mathcal{R}}')}d\frac{\overline{p}}{\hbar^3} = i\delta(\overline{\mathcal{R}}-\overline{\mathcal{R}}') \tag{46}$$

Si ha anche:

$$\mathcal{K}(\overline{\mathcal{R}}-\overline{\mathcal{R}}',t-t_0)_{t=t_0} = \frac{i}{(2\pi)^3}\int e^{-\frac{i}{\hbar}\overline{p}\cdot(\overline{\mathcal{R}}'-\overline{\mathcal{R}})}d\frac{\overline{p}}{\hbar^3} = -\frac{i}{(2\pi)^3}\int e^{-\frac{i}{\hbar}\overline{p}\cdot(\overline{\mathcal{R}}'-\overline{\mathcal{R}})}d(-\frac{\overline{p}}{\hbar^3})$$

Ponendo per semplicità $\overline{q}=-\overline{p}/\hbar$ segue:

$$\mathcal{K}(\overline{\mathcal{R}}-\overline{\mathcal{R}}',t-t_0)_{t=t_0} = -\frac{i}{(2\pi)^3}\int e^{i\overline{q}\cdot(\overline{\mathcal{R}}'-\overline{\mathcal{R}})}d\overline{q}$$

ovvero

$$\mathcal{K}(\overline{\mathcal{R}}-\overline{\mathcal{R}}',t-t_0)_{t=t_0} = -\mathcal{K}(\overline{\mathcal{R}}'-\overline{\mathcal{R}},t-t_0)_{t=t_0}$$

• Se $\mathcal{V}=0$ la (31), indicando con $\phi(\overline{\mathcal{R}},t)$ l'ampiezza di probabilità della particella libera in $\overline{\mathcal{R}}$ all'istante t, diviene:

$$\phi(\overline{\mathcal{R}},t) = -i\int\mathcal{K}(\overline{\mathcal{R}}-\overline{\mathcal{R}}',t-t_0)\psi(\overline{\mathcal{R}}',t_0)d\overline{\mathcal{R}}' \tag{47}$$

• Anche nel caso della funzione di Green per l'equazione libera di Schrödinger conviene introdurre per il propagatore la seguente definizione

$$\mathcal{K}(\overline{\mathcal{R}}-\overline{\mathcal{R}}',t-t_0) \to \theta(t-t_0)\mathcal{K}(\overline{\mathcal{R}}-\overline{\mathcal{R}}',t-t_0)$$

Il propagatore così definito soddisfa le equazioni

$$\begin{aligned} S_{\mathcal{R}}\mathcal{K}(\overline{\mathcal{R}}-\overline{\mathcal{R}}',t-t_0) &= \hbar\delta(t-t_0)\delta(\overline{\mathcal{R}}-\overline{\mathcal{R}}') \\ \mathcal{K}(\overline{\mathcal{R}}-\overline{\mathcal{R}}',t-t_0)S_{\mathcal{R}'} &= \hbar\delta(t-t_0)\delta(\overline{\mathcal{R}}-\overline{\mathcal{R}}') \end{aligned} \tag{48}$$

ed è espresso da (v. eq. (44))

$$\mathcal{K}(\overline{\mathcal{R}}-\overline{\mathcal{R}}',t-t_0) = \frac{i}{\hbar^3}\theta(t-t_0)\int e^{\frac{i}{\hbar}\overline{p}\cdot(\overline{\mathcal{R}}-\overline{\mathcal{R}}')}e^{-\frac{i}{\hbar}\mathcal{E}(t-t_0)}d\overline{p}$$

• Si ha anche

$$S_{\mathcal{R}}\phi(\overline{\mathcal{R}},t) = 0 \quad ; \quad S_{\mathcal{R}'}\phi(\overline{\mathcal{R}}',t_0) = 0 \tag{49}$$

Infatti, ad esempio (v. eq. (48))

$$\begin{aligned} S_{\mathcal{R}}\phi(\overline{\mathcal{R}},t) &= -i\int S_{\mathcal{R}}\mathcal{K}(\overline{\mathcal{R}}-\overline{\mathcal{R}}',t-t_0)\psi(\overline{\mathcal{R}}',t_0)d\overline{\mathcal{R}}' \\ &= -i\int \hbar\delta(t-t_0)\delta(\overline{\mathcal{R}}-\overline{\mathcal{R}}')\psi(\overline{\mathcal{R}}',t_0)d\overline{\mathcal{R}}' \\ &= -i\hbar\delta(t-t_0)\int \delta(\overline{\mathcal{R}}-\overline{\mathcal{R}}')\psi(\overline{\mathcal{R}}',t_0)d\overline{\mathcal{R}}' \\ &= -i\hbar\delta(t-t_0)\psi(\overline{\mathcal{R}},t_0) \end{aligned}$$

e $\delta(t-t_0)$ è nulla per $t \neq t_0$ (per $t = t_0$ è indefinita).

* * *

Poniamo nella (34) $\overline{\mathcal{R}} = \overline{\mathcal{R}}_1$ e $t = t_1$, moltiplichiamo per $\mathcal{K}(\overline{\mathcal{R}}-\overline{\mathcal{R}}_1,t-t_1)$, che è il propagatore per la particella libera (v. eq. (44)), e integriamo rispetto a $\overline{\mathcal{R}}_1$ e t_1:

$$\begin{aligned} \int \mathcal{K}(\overline{\mathcal{R}}-\overline{\mathcal{R}}_1,t-t_1)\left\{\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial t_1}-\frac{\hbar^2}{2m_0}\nabla^2_{\overline{\mathcal{R}}_1}+\mathcal{V}(\overline{\mathcal{R}}_1,t_1)\right)\mathcal{K}\big[\,\overline{\mathcal{R}}_1,t_1;\overline{\mathcal{R}}',t_0|\mathcal{V}\big]\right\}d\overline{\mathcal{R}}_1dt_1 = \\ = \hbar\int \mathcal{K}(\overline{\mathcal{R}}-\overline{\mathcal{R}}_1,t-t_1)\delta(t_1-t_0)\delta(\overline{\mathcal{R}}_1-\overline{\mathcal{R}}')d\overline{\mathcal{R}}_1dt_1 \end{aligned}$$

ovvero, sviluppando il termine contenuto entro parentesi graffe:

$$\begin{aligned} &\int \mathcal{K}(\overline{\mathcal{R}}-\overline{\mathcal{R}}_1,t-t_1)\left\{-i\hbar\frac{\partial}{\partial t_1}\mathcal{K}\big[\,\overline{\mathcal{R}}_1,t_1;\overline{\mathcal{R}}',t_0|\mathcal{V}\big]\right\}d\overline{\mathcal{R}}_1dt_1+ \\ &\quad -\int \mathcal{K}(\overline{\mathcal{R}}-\overline{\mathcal{R}}_1,t-t_1)\left\{\frac{\hbar^2}{2m_0}\nabla^2_{\overline{\mathcal{R}}_1}\mathcal{K}\big[\,\overline{\mathcal{R}}_1,t_1;\overline{\mathcal{R}}',t_0|\mathcal{V}\big]\right\}d\overline{\mathcal{R}}_1dt_1+ \\ &\quad +\int \mathcal{K}(\overline{\mathcal{R}}-\overline{\mathcal{R}}_1,t-t_1)\mathcal{V}(\overline{\mathcal{R}}_1,t_1)\mathcal{K}\big[\,\overline{\mathcal{R}}_1,t_1;\overline{\mathcal{R}}',t_0|\mathcal{V}\big]d\overline{\mathcal{R}}_1dt_1 = \hbar\mathcal{K}(\overline{\mathcal{R}}-\overline{\mathcal{R}}',t-t_0) \end{aligned} \tag{50}$$

Ma si ha

$$\int f\frac{dg}{dt}dt = \int\frac{dfg}{dt}dt - \int\frac{df}{dt}gdt = \int d(fg) - \int\frac{df}{dt}gdt = [fg] - \int\frac{df}{dt}gdt = -\int\frac{df}{dt}gdt$$

e inoltre, ricordando che $\nabla^2(fg) = (\nabla^2 f)g + 2\nabla f \cdot \nabla g + f(\nabla^2 g)$ (v. eq. (I24) dell'Appendice I dello studio (a)) e anche che $\nabla \cdot (f\nabla g) = \nabla f \cdot \nabla g + f(\nabla \cdot \nabla g)$ (v. eq. (A12) dell'Appendice A dello studio (a))

$$\begin{aligned}
\int f(\nabla^2 g) d\overline{\mathcal{R}} &= \int \left\{ \nabla^2(fg) - 2\nabla f \cdot \nabla g - (\nabla^2 f)g \right\} d\overline{\mathcal{R}} \\
&= \int \left\{ \nabla^2(fg) - 2\big(\nabla \cdot (f\nabla g) - f(\nabla^2 g)\big) - (\nabla^2 f)g \right\} d\overline{\mathcal{R}} \\
&= \int \nabla \cdot \big(\nabla(fg) - 2f\nabla g\big) d\overline{\mathcal{R}} + 2\int f(\nabla^2 g) d\overline{\mathcal{R}} - \int (\nabla^2 f) g d\overline{\mathcal{R}}
\end{aligned}$$

ovvero

$$-\int f(\nabla^2 g) d\overline{\mathcal{R}} = \int \nabla \cdot (\nabla(fg) - 2f\nabla g) d\overline{\mathcal{R}} - \int (\nabla^2 f) g d\overline{\mathcal{R}}$$

da cui

$$\int f(\nabla^2 g) d\overline{\mathcal{R}} = -\int_\sigma \{\nabla(fg) - 2f\nabla g\} \cdot \overline{n} d\sigma + \int (\nabla^2 f) g d\overline{\mathcal{R}}$$

Supponendo che l'integrale di superficie si annulli rimane

$$\int f(\nabla^2 g) d\overline{\mathcal{R}} = \int (\nabla^2 f) g d\overline{\mathcal{R}}$$

cosicché la (50) diventa $\big(f \equiv K(\overline{\mathcal{R}} - \overline{\mathcal{R}}_1, t - t_1)\ ;\ g \equiv K\big[\overline{\mathcal{R}}_1, t_1; \overline{\mathcal{R}}', t_0 | \mathcal{V}(\overline{\mathcal{R}}_1, t_1)\big]\big)$

$$\begin{aligned}
&\int \left\{ i\hbar \frac{\partial}{\partial t_1} \mathcal{K}(\overline{\mathcal{R}} - \overline{\mathcal{R}}_1, t - t_1) \right\} \mathcal{K}\big[\overline{\mathcal{R}}_1, t_1; \overline{\mathcal{R}}', t_0 | \mathcal{V}(\overline{\mathcal{R}}_1, t_1)\big] d\overline{\mathcal{R}}_1 dt_1 + \\
&\quad - \int \left\{ \frac{\hbar^2}{2m_0} \nabla^2_{\overline{\mathcal{R}}_1} \mathcal{K}(\overline{\mathcal{R}} - \overline{\mathcal{R}}_1, t - t_1) \right\} \mathcal{K}\big[\overline{\mathcal{R}}_1, t_1; \overline{\mathcal{R}}', t_0 | \mathcal{V}(\overline{\mathcal{R}}_1, t_1)\big] d\overline{\mathcal{R}}_1 dt_1 + \\
&\quad + \int \mathcal{K}(\overline{\mathcal{R}} - \overline{\mathcal{R}}_1, t - t_1) \mathcal{V}(\overline{\mathcal{R}}_1, t_1) \mathcal{K}\big[\overline{\mathcal{R}}_1, t_1; \overline{\mathcal{R}}', t_0 | \mathcal{V}\big] d\overline{\mathcal{R}}_1 dt_1 = \hbar \mathcal{K}(\overline{\mathcal{R}} - \overline{\mathcal{R}}', t - t_0)
\end{aligned}$$

ovvero

$$\begin{aligned}
&\int \left\{ \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t_1} - \frac{\hbar^2}{2m_0} \nabla^2_{\overline{\mathcal{R}}_1} \right) \mathcal{K}(\overline{\mathcal{R}} - \overline{\mathcal{R}}_1, t - t_1) \right\} \mathcal{K}\big[\overline{\mathcal{R}}_1, t_1; \overline{\mathcal{R}}', t_0 | \mathcal{V}(\overline{\mathcal{R}}_1, t_1)\big] d\overline{\mathcal{R}}_1 dt_1 = \\
&\quad = \hbar \mathcal{K}(\overline{\mathcal{R}} - \overline{\mathcal{R}}', t - t_0) - \int \mathcal{K}(\overline{\mathcal{R}} - \overline{\mathcal{R}}_1, t - t_1) \mathcal{V}(\overline{\mathcal{R}}_1, t_1) \mathcal{K}\big[\overline{\mathcal{R}}_1, t_1; \overline{\mathcal{R}}', t_0 | \mathcal{V}\big] d\overline{\mathcal{R}}_1 dt_1
\end{aligned}$$

da cui infine, per la seconda delle (48),

$$\begin{aligned}
&\int \hbar \delta(t - t_1) \delta(\overline{\mathcal{R}} - \overline{\mathcal{R}}_1) \mathcal{K}\big[\overline{\mathcal{R}}_1, t_1; \overline{\mathcal{R}}', t_0 | \mathcal{V}(\overline{\mathcal{R}}_1, t_1)\big] d\overline{\mathcal{R}}_1 dt_1 = \\
&\quad = \hbar \mathcal{K}(\overline{\mathcal{R}} - \overline{\mathcal{R}}', t - t_0) - \int \mathcal{K}(\overline{\mathcal{R}} - \overline{\mathcal{R}}_1, t - t_1) \mathcal{V}(\overline{\mathcal{R}}_1, t_1) \mathcal{K}\big[\overline{\mathcal{R}}_1, t_1; \overline{\mathcal{R}}', t_0 | \mathcal{V}\big] d\overline{\mathcal{R}}_1 dt_1
\end{aligned}$$

e quindi otteniamo la seguente equazione integrale equivalente alla (34):

$$\begin{aligned}
&\mathcal{K}\big[\overline{\mathcal{R}}, t; \overline{\mathcal{R}}', t_0 | \mathcal{V}(\overline{\mathcal{R}}, t)\big] = \\
&\quad = \mathcal{K}(\overline{\mathcal{R}} - \overline{\mathcal{R}}', t - t_0) - \frac{1}{\hbar} \int \mathcal{K}(\overline{\mathcal{R}} - \overline{\mathcal{R}}_1, t - t_1) \mathcal{V}(\overline{\mathcal{R}}_1, t_1) \mathcal{K}\big[\overline{\mathcal{R}}_1, t_1; \overline{\mathcal{R}}', t_0 | \mathcal{V}\big] d\overline{\mathcal{R}}_1 dt_1 \qquad (51)
\end{aligned}$$

La (51) può essere risolta con metodo iterativo:

$$
\begin{aligned}
&\mathcal{K}\big[\,\overline{\mathcal{R}},t;\overline{\mathcal{R}}',t_0|\mathcal{V}\,(\overline{\mathcal{R}},t)\big] = \mathcal{K}(\overline{\mathcal{R}}-\overline{\mathcal{R}}',t-t_0)+\\
&\quad -\frac{1}{\hbar}\int \mathcal{K}(\overline{\mathcal{R}}-\overline{\mathcal{R}}_1,t-t_1)\mathcal{V}(\overline{\mathcal{R}}_1,t_1)\mathcal{K}(\overline{\mathcal{R}}_1-\overline{\mathcal{R}}',t_1-t_0)d\overline{\mathcal{R}}_1dt_1+\\
&\quad +\frac{1}{\hbar^2}\int \mathcal{K}(\overline{\mathcal{R}}-\overline{\mathcal{R}}_1,t-t_1)\mathcal{V}(\overline{\mathcal{R}}_1,t_1)\mathcal{K}(\overline{\mathcal{R}}_1-\overline{\mathcal{R}}_2,t_1-t_2)\mathcal{V}(\overline{\mathcal{R}}_2,t_2)\mathcal{K}(\overline{\mathcal{R}}_2-\overline{\mathcal{R}}',t_2-t_0)\cdot\\
&\qquad\qquad\qquad\qquad\qquad\qquad\qquad\qquad\qquad\qquad\qquad\qquad\cdot d\overline{\mathcal{R}}_1d\overline{\mathcal{R}}_2dt_1dt_2+\\
&\quad -\frac{1}{\hbar^3}\int \mathcal{K}(\overline{\mathcal{R}}-\overline{\mathcal{R}}_1,t-t_1)\mathcal{V}(\overline{\mathcal{R}}_1,t_1)\mathcal{K}(\overline{\mathcal{R}}_1-\overline{\mathcal{R}}_2,t_1-t_2)\mathcal{V}(\overline{\mathcal{R}}_2,t_2)\cdot\\
&\qquad\quad \cdot\mathcal{K}(\overline{\mathcal{R}}_2-\overline{\mathcal{R}}_3,t_2-t_3)\mathcal{V}(\overline{\mathcal{R}}_3,t_3)\mathcal{K}(\overline{\mathcal{R}}_3-\overline{\mathcal{R}}',t_3-t_0)d\overline{\mathcal{R}}_1d\overline{\mathcal{R}}_2d\overline{\mathcal{R}}_3dt_1dt_2dt_3+\cdots
\end{aligned}
\tag{52}
$$

dove, in virtù della (32), si ha

$$
t > t_1 > t_2 > t_3 > \ldots > t_0
$$

Il modo in cui la (52) è costruita è facilmente comprensibile: in luogo della

$$
\mathcal{K}\big[\,\overline{\mathcal{R}}_1,t_1;\overline{\mathcal{R}}',t_0|\mathcal{V}(\overline{\mathcal{R}}_1,t_1)\big]
$$

che compare nell'integrando a membro destro della (51) si pone la stessa (51) dopo averla calcolata per $\overline{\mathcal{R}}=\overline{\mathcal{R}}_1$ e $t=t_1$ avendo ovviamente provveduto a sostituire $\overline{\mathcal{R}}_1$ e t_1 già in essa presenti con $\overline{\mathcal{R}}_2$ e t_2, cioè:

$$
\begin{aligned}
&\mathcal{K}\big[\,\overline{\mathcal{R}}_1,t_1;\overline{\mathcal{R}}',t_0|\mathcal{V}(\overline{\mathcal{R}}_1,t_1)\big] = \mathcal{K}(\overline{\mathcal{R}}_1-\overline{\mathcal{R}}',t_1-t_0)+\\
&\qquad\qquad -\frac{1}{\hbar}\int\mathcal{K}(\overline{\mathcal{R}}_1-\overline{\mathcal{R}}_2,t_1-t_2)\mathcal{V}(\overline{\mathcal{R}}_2,t_2)\mathcal{K}\big[\,\overline{\mathcal{R}}_2,t_2;\overline{\mathcal{R}}',t_0|\mathcal{V}(\overline{\mathcal{R}}_2,t_2)\big]d\overline{\mathcal{R}}_2dt_2
\end{aligned}
$$

ottenendo così

$$
\begin{aligned}
&\mathcal{K}\big[\,\overline{\mathcal{R}},t;\overline{\mathcal{R}}',t_0|\mathcal{V}\,(\overline{\mathcal{R}},t)\big] = \mathcal{K}(\overline{\mathcal{R}}-\overline{\mathcal{R}}',t-t_0)+\\
&\quad -\frac{1}{\hbar}\int \mathcal{K}(\overline{\mathcal{R}}-\overline{\mathcal{R}}_1,t-t_1)\mathcal{V}(\overline{\mathcal{R}}_1,t_1)\Big\{\mathcal{K}(\overline{\mathcal{R}}_1-\overline{\mathcal{R}}',t_1-t_0)+\\
&\quad -\frac{1}{\hbar}\int \mathcal{K}(\overline{\mathcal{R}}_1-\overline{\mathcal{R}}_2,t_1-t_2)\mathcal{V}(\overline{\mathcal{R}}_2,t_2)\mathcal{K}\big[\,\overline{\mathcal{R}}_2,t_2;\overline{\mathcal{R}}',t_0|\mathcal{V}(\overline{\mathcal{R}}_2,t_2)\big]d\overline{\mathcal{R}}_2dt_2\Big\}\,d\overline{\mathcal{R}}_1dt_1
\end{aligned}
$$

e, nuovamente, in luogo della $\mathcal{K}\big[\,\overline{\mathcal{R}}_2,t_2;\overline{\mathcal{R}}',t_0|\mathcal{V}(\overline{\mathcal{R}}_2,t_2)\big]$ si pone la (51) calcolata per $\overline{\mathcal{R}}=\overline{\mathcal{R}}_2$ e $t=t_2$ avendo ovviamente provveduto a sostituire $\overline{\mathcal{R}}_2$ e t_2 già in essa presenti con $\overline{\mathcal{R}}_3$ e t_3, cioè:

$$
\begin{aligned}
&\mathcal{K}\big[\,\overline{\mathcal{R}}_2,t_2;\overline{\mathcal{R}}',t_0|\mathcal{V}(\overline{\mathcal{R}}_2,t_2)\big] = \mathcal{K}(\overline{\mathcal{R}}_2-\overline{\mathcal{R}}',t_2-t_0)+\\
&\qquad\qquad -\frac{1}{\hbar}\int\mathcal{K}(\overline{\mathcal{R}}_2-\overline{\mathcal{R}}_3,t_2-t_3)\mathcal{V}(\overline{\mathcal{R}}_3,t_3)\mathcal{K}\big[\,\overline{\mathcal{R}}_3,t_3;\overline{\mathcal{R}}',t_0|\mathcal{V}(\overline{\mathcal{R}}_3,t_3)\big]d\overline{\mathcal{R}}_3dt_3
\end{aligned}
$$

ottenendo così

$$\begin{aligned}
&\mathcal{K}\big[\,\overline{\mathcal{R}},t;\overline{\mathcal{R}}',t_0|\mathcal{V}\,(\overline{\mathcal{R}},t)\big]=\mathcal{K}(\overline{\mathcal{R}}-\overline{\mathcal{R}}',t-t_0)+\\
&-\frac{1}{\hbar}\int\mathcal{K}(\overline{\mathcal{R}}-\overline{\mathcal{R}}_1,t-t_1)\mathcal{V}(\overline{\mathcal{R}}_1,t_1)\Big\{\mathcal{K}(\overline{\mathcal{R}}_1-\overline{\mathcal{R}}',t_1-t_0)+\\
&-\frac{1}{\hbar}\int\mathcal{K}(\overline{\mathcal{R}}_1-\overline{\mathcal{R}}_2,t_1-t_2)\mathcal{V}(\overline{\mathcal{R}}_2,t_2)\Big(\mathcal{K}(\overline{\mathcal{R}}_2-\overline{\mathcal{R}}',t_2-t_0)+\\
&-\frac{1}{\hbar}\int\mathcal{K}(\overline{\mathcal{R}}_2-\overline{\mathcal{R}}_3,t_2-t_3)\mathcal{V}(\overline{\mathcal{R}}_3,t_3)\mathcal{K}\big[\,\overline{\mathcal{R}}_3,t_3;\overline{\mathcal{R}}',t_0|\mathcal{V}(\overline{\mathcal{R}}_3,t_3)\big]d\overline{\mathcal{R}}_3dt_3\Big)d\overline{\mathcal{R}}_2dt_2\Big\}\,d\overline{\mathcal{R}}_1dt_1
\end{aligned}$$

e ancora, in luogo della $\mathcal{K}\big[\,\overline{\mathcal{R}}_3,t_3;\overline{\mathcal{R}}',t_0|\mathcal{V}(\overline{\mathcal{R}}_3,t_3)\big]\cdots$ ecc.

Ritorniamo alla (52). Inserendola nella (31) che qui riscriviamo per comodità

$$\psi\,(\overline{\mathcal{R}},t)=-i\int\mathcal{K}\big[\,\overline{\mathcal{R}},t;\overline{\mathcal{R}}',t_0|\mathcal{V}(\overline{\mathcal{R}},t)\big]\psi(\overline{\mathcal{R}}',t_0)d\overline{\mathcal{R}}'$$

si ottiene:

$$\begin{aligned}
&\psi\,(\overline{\mathcal{R}},t)=-i\int\mathcal{K}(\overline{\mathcal{R}}-\overline{\mathcal{R}}',t-t_0)\psi(\overline{\mathcal{R}}',t_0)d\overline{\mathcal{R}}'+\\
&-i\frac{-1}{\hbar}\iint\mathcal{K}(\overline{\mathcal{R}}-\overline{\mathcal{R}}_1,t-t_1)\mathcal{V}(\overline{\mathcal{R}}_1,t_1)\mathcal{K}(\overline{\mathcal{R}}_1-\overline{\mathcal{R}}',t_1-t_0)d\overline{\mathcal{R}}_1dt_1\psi(\overline{\mathcal{R}}',t_0)d\overline{\mathcal{R}}'+\\
&-i\frac{1}{\hbar^2}\iint\mathcal{K}(\overline{\mathcal{R}}-\overline{\mathcal{R}}_1,t-t_1)\mathcal{V}(\overline{\mathcal{R}}_1,t_1)\mathcal{K}(\overline{\mathcal{R}}_1-\overline{\mathcal{R}}_2,t_1-t_2)\mathcal{V}(\overline{\mathcal{R}}_2,t_2)\mathcal{K}(\overline{\mathcal{R}}_2-\overline{\mathcal{R}}',t_2-t_0)\cdot\\
&\qquad\qquad\qquad\qquad\qquad\qquad\cdot d\overline{\mathcal{R}}_1d\overline{\mathcal{R}}_2dt_1dt_2\psi(\overline{\mathcal{R}}',t_0)d\overline{\mathcal{R}}'+\\
&-i\frac{-1}{\hbar^3}\iint\mathcal{K}(\overline{\mathcal{R}}-\overline{\mathcal{R}}_1,t-t_1)\mathcal{V}(\overline{\mathcal{R}}_1,t_1)\mathcal{K}(\overline{\mathcal{R}}_1-\overline{\mathcal{R}}_2,t_1-t_2)\mathcal{V}(\overline{\mathcal{R}}_2,t_2)\mathcal{K}(\overline{\mathcal{R}}_2-\overline{\mathcal{R}}_3,t_2-t_3)\cdot\\
&\cdot\mathcal{V}(\overline{\mathcal{R}}_3,t_3)\mathcal{K}(\overline{\mathcal{R}}_3-\overline{\mathcal{R}}',t_3-t_0)d\overline{\mathcal{R}}_1d\overline{\mathcal{R}}_2d\overline{\mathcal{R}}_3dt_1dt_2dt_3\psi(\overline{\mathcal{R}}',t_0)d\overline{\mathcal{R}}'+\cdots
\end{aligned}\tag{53}$$

ovvero

$$\begin{aligned}
&\psi\,(\overline{\mathcal{R}},t)=-i\int\mathcal{K}(\overline{\mathcal{R}}-\overline{\mathcal{R}}',t-t_0)\psi(\overline{\mathcal{R}}',t_0)d\overline{\mathcal{R}}'+\\
&-\frac{1}{\hbar}\int\mathcal{K}(\overline{\mathcal{R}}-\overline{\mathcal{R}}_1,t-t_1)\mathcal{V}(\overline{\mathcal{R}}_1,t_1)\Big\{(-i)\int\mathcal{K}(\overline{\mathcal{R}}_1-\overline{\mathcal{R}}',t_1-t_0)\psi(\overline{\mathcal{R}}',t_0)d\overline{\mathcal{R}}'\Big\}d\overline{\mathcal{R}}_1dt_1+\\
&+\frac{1}{\hbar^2}\int\mathcal{K}(\overline{\mathcal{R}}-\overline{\mathcal{R}}_1,t-t_1)\mathcal{V}(\overline{\mathcal{R}}_1,t_1)\mathcal{K}(\overline{\mathcal{R}}_1-\overline{\mathcal{R}}_2,t_1-t_2)\mathcal{V}(\overline{\mathcal{R}}_2,t_2)\cdot\\
&\qquad\qquad\qquad\cdot\Big\{(-i)\int\mathcal{K}(\overline{\mathcal{R}}_2-\overline{\mathcal{R}}',t_2-t_0)\psi(\overline{\mathcal{R}}',t_0)d\overline{\mathcal{R}}'\Big\}d\overline{\mathcal{R}}_1d\overline{\mathcal{R}}_2dt_1dt_2+\\
&-\frac{1}{\hbar^3}\int\mathcal{K}(\overline{\mathcal{R}}-\overline{\mathcal{R}}_1,t-t_1)\mathcal{V}(\overline{\mathcal{R}}_1,t_1)\mathcal{K}(\overline{\mathcal{R}}_1-\overline{\mathcal{R}}_2,t_1-t_2)\mathcal{V}(\overline{\mathcal{R}}_2,t_2)\mathcal{K}(\overline{\mathcal{R}}_2-\overline{\mathcal{R}}_3,t_2-t_3)\cdot\\
&\cdot\mathcal{V}(\overline{\mathcal{R}}_3,t_3)\Big\{(-i)\int\mathcal{K}(\overline{\mathcal{R}}_3-\overline{\mathcal{R}}',t_3-t_0)\psi(\overline{\mathcal{R}}',t_0)d\overline{\mathcal{R}}'\Big\}\cdot d\overline{\mathcal{R}}_1d\overline{\mathcal{R}}_2d\overline{\mathcal{R}}_3dt_1dt_2dt_3+\cdots
\end{aligned}\tag{54}$$

Tenendo conto della (47) ed esplicitando i simboli di integrazione si ha infine

$$\begin{aligned}
&\psi\,(\overline{\mathcal{R}},t) = \phi\,(\overline{\mathcal{R}},t) + \\
&-\frac{1}{\hbar}\iint \mathcal{K}(\overline{\mathcal{R}}-\overline{\mathcal{R}}_1,t-t_1)\mathcal{V}(\overline{\mathcal{R}}_1,t_1)\phi(\overline{\mathcal{R}}_1,t_1)d\overline{\mathcal{R}}_1dt_1 + \\
&+\frac{1}{\hbar^2}\iiiint \mathcal{K}(\overline{\mathcal{R}}-\overline{\mathcal{R}}_1,t-t_1)\mathcal{V}(\overline{\mathcal{R}}_1,t_1)\mathcal{K}(\overline{\mathcal{R}}_1-\overline{\mathcal{R}}_2,t_1-t_2)\mathcal{V}(\overline{\mathcal{R}}_2,t_2)\phi(\overline{\mathcal{R}}_2,t_2)\,\cdot \\
&\qquad\qquad\qquad\qquad\qquad\qquad\qquad\qquad\qquad\qquad\qquad\qquad\cdot\, d\overline{\mathcal{R}}_1d\overline{\mathcal{R}}_2dt_1dt_2 + \\
&-\frac{1}{\hbar^3}\iiiint\!\!\iint \mathcal{K}(\overline{\mathcal{R}}-\overline{\mathcal{R}}_1,t-t_1)\mathcal{V}(\overline{\mathcal{R}}_1,t_1)\mathcal{K}(\overline{\mathcal{R}}_1-\overline{\mathcal{R}}_2,t_1-t_2)\mathcal{V}(\overline{\mathcal{R}}_2,t_2)\,\cdot \\
&\qquad\qquad\cdot\,\mathcal{K}(\overline{\mathcal{R}}_2-\overline{\mathcal{R}}_3,t_2-t_3)\mathcal{V}(\overline{\mathcal{R}}_3,t_3)\phi(\overline{\mathcal{R}}_3,t_3)d\overline{\mathcal{R}}_1d\overline{\mathcal{R}}_2d\overline{\mathcal{R}}_3dt_1dt_2dt_3 + \cdots
\end{aligned} \tag{55}$$

con $t_1 > t_2 > t_3 \cdots$.
Questa è la ampiezza di probabilità della particella dotata di energia potenziale $\mathcal{V}\,(\overline{\mathcal{R}},t)$ ottenuta come una somma di termini che può essere troncata in modo da ottenere l'approssimazione che si desidera, essendo nota la ampiezza di probabilità iniziale $\psi(\overline{\mathcal{R}},t_0)$ che compare nella espressione di $\phi\,(\overline{\mathcal{R}},t)$ (v. eq. (47)) e nella quale è $t_0 < t$.

APPENDICI

Appendice A

In questa Appendice prendiamo in esame alcune proprietà della Meccanica di Schrödinger. Iniziamo da alcune considerazioni che riportiamo, per comodità, dal par. 1.4.1 della Seconda Parte dello studio (a).
Indichiamo con $|\chi(t_0)\rangle$ il vettore di stato di un certo sistema fisico al tempo t_0. Assumiamo che $|\chi(t_0)\rangle$ sia normalizzato, cioè che

$$\langle\chi(t_0)|\chi(t_0)\rangle = 1 \tag{A1}$$

In Meccanica di Schrödinger l'evoluzione temporale di $|\chi\rangle$ è espressa dalla trasformazione

$$|\chi(t)\rangle = T_S(t,t_0)|\chi(t_0)\rangle \tag{A2}$$

dove $T_S(t,t_0)$ è un operatore lineare e unitario indipendente da $|\chi(t_0)\rangle$ tale che

$$T_S(t,t) = \mathbb{1} \quad \textit{per qualunque } t \tag{A3}$$

Esso deve essere *lineare* perché deve conservarsi immutato nel tempo il Principio di sovrapposizione degli stati, cioè se in t_0 uno stato è sovrapposizione di $|A\rangle$ e $|B\rangle$

$$|\chi(t_0)\rangle = a|A(t_0)\rangle + b|B(t_0)\rangle$$

allora anche in t deve essere $|\chi(t)\rangle = a|A(t)\rangle + b|B(t)\rangle$, il che equivale ad imporre che a e b siano scambiabili con T_S nello sviluppo che segue

$$\begin{aligned}
|\chi(t)\rangle &= T_S(t,t_0)|\chi(t_0)\rangle \\
&= T_S(t,t_0)a|A(t_0)\rangle + T_S(t,t_0)b|B(t_0)\rangle \\
&= aT_S(t,t_0)|A(t_0)\rangle + bT_S(t,t_0)|B(t_0)\rangle \\
&= a|A(t)\rangle + b|B(t)\rangle
\end{aligned}$$

e, per definizione, lo scambio è lecito se T_S è lineare.
La condizione espressa dalla (A1), valida all'istante iniziale t_0, deve mantenersi invariata in tutti gli istanti successivi, cioè

$$\langle\chi(t)|\chi(t)\rangle = 1 \tag{A4}$$

Tenendo presente che dalla (A2) si ricava

$$\langle\chi(t)| = \langle\chi(t_0)|T_S^\dagger(t,t_0), \tag{A5}$$

la (A4) diviene

$$\langle\chi(t_0)|T_S^\dagger(t,t_0)T_S(t,t_0)|\chi(t_0)\rangle = 1$$

Questa coincide con la (A4) se

$$T_S^\dagger T_S = \mathbb{1} \tag{A6}$$

cioè se T_S è *unitario.*

L'operatore $T_S(t, t_0)$ è inoltre caratterizzato dalla proprietà gruppale

$$T_S(t', t_0) = T_S(t', t) T_S(t, t_0) \tag{A7}$$

Infatti (v. eq. (A2))

$$|\chi(t')\rangle = T_S(t', t)|\chi(t)\rangle = T_S(t', t) T_S(t, t_0)|\chi(t_0)\rangle \tag{A8}$$

Ma si ha anche la relazione

$$|\chi(t')\rangle = T_S(t', t_0)|\chi(t_0)\rangle$$

che, confrontata con la (A8), implica la (A7).
Osserviamo anche che se nel membro destro della (A8) poniamo $t_0 = t'$ si ha

$$|\chi(t')\rangle = T_S(t', t) T_S(t, t')|\chi(t')\rangle$$

e quindi deve essere $T_S(t', t) T_S(t, t') = \mathbb{1}$ e perciò

$$T_S(t', t) = T_S^{-1}(t, t')$$

Per ricavare l'equazione di Schrödinger per $|\chi(t)\rangle$ deriviamo la (A2) rispetto a t:

$$\frac{d|\chi(t)\rangle}{dt} = \frac{dT_S(t, t_0)}{dt}|\chi(t_0)\rangle$$

Assumiamo

$$\frac{dT_S(t, t_0)}{dt} = -\frac{i}{\hbar}\mathcal{H}_S(t) T_S(t, t_0) \tag{A9}$$

dove $\mathcal{H}_S(t)$ è l'operatore associato all'hamiltoniana del sistema fisico al quale è riferito $|\chi\rangle$.
La scrittura $\mathcal{H}_S(t)$ sta a significare che in generale occorrerà considerare una dipendenza esplicita dell'operatore hamiltoniano da t, oltre che quella usuale da q e p, cioè è una abbreviazione di $\mathcal{H}_S(q, p, t)$.
Segue, moltiplicando i membri della (A9) per $|\chi(t_0)\rangle$ e tenendo conto della (A2):

$$i\hbar\frac{d|\chi(t)\rangle}{dt} = \mathcal{H}_S(t)|\chi(t)\rangle \tag{A10}$$

che è l'equazione di Schrödinger del sistema fisico dotato di hamiltoniano $\mathcal{H}_S(t)$.
Osserviamo che si può scrivere

$$\left(i\hbar\frac{d}{dt}\right)^* \langle\chi(t)| = \langle\chi(t)|\mathcal{H}_S^\dagger(t)$$

da cui, nell'ipotesi, che assumiamo normalmente verificata, che $\mathcal{H}_S(t)$ sia hermitiano, segue:

$$-i\hbar\frac{d\langle\chi(t)|}{dt} = \langle\chi(t)|\mathcal{H}_S(t) \tag{A11}$$

che è ancora l'equazione di Schrödinger espressa nel bra $\langle\chi(t)|$.

Consideriamo ora lo sviluppo in serie di $T_S(t+\triangle t,t) \equiv T_S(t',t)$ in t:

$$T_S(t',t) = T_S(t,t) + \frac{dT_S(t',t)}{dt'}\Big|_{t'=t}\triangle t + \cdots$$

Tenendo presente la (A9) si può scrivere

$$T_S(t',t) = \mathbb{1} - \frac{i}{\hbar}\big(\mathcal{H}_S(t')T_S(t',t)\big)_{t'=t}\triangle t + \cdots = \mathbb{1} - \frac{i}{\hbar}\mathcal{H}_S(t)T_S(t,t)\triangle t + \cdots$$

e infine, tenendo presente la (A3):

$$T_S(t',t) = \mathbb{1} - \frac{i}{\hbar}\triangle t\mathcal{H}_S(t) + \cdots \tag{A12}$$

Assumendo che $\mathcal{H}_S(t)$ sia hermitiano si può scrivere:

$$T_S^\dagger(t',t) = \mathbb{1} + \frac{i}{\hbar}\triangle t\mathcal{H}_S^\dagger(t) + \cdots = \mathbb{1} + \frac{i}{\hbar}\triangle t\mathcal{H}_S(t) + \cdots \tag{A13}$$

e quindi

$$T_S^\dagger(t',t)T_S(t',t) = \mathbb{1} \quad ; \quad T_S^\dagger(t',t) = T_S^{-1}(t',t) = T_S(t,t') \tag{A14}$$

e abbiamo così ottenuto una dimostrazione che T_S è un operatore unitario. Segue che il modulo del vettore $|\chi(t)\rangle$ rimane invariato nel tempo e quindi $|\chi(t)\rangle$ rimane normalizzato, se tale era $|\chi(t_0)\rangle$:

$$\langle\chi(t)|\chi(t)\rangle = \langle\chi(t_0)|T_S^\dagger(t,t_0)T_S(t,t_0)|\chi(t_0)\rangle = \langle\chi(t_0)|\chi(t_0)\rangle = 1 \tag{A15}$$

* * *

Per ottenere $T_S(t,t_0)$ dalla (A9) occorre integrarla con la condizione iniziale $T_S(t_0,t_0) = \mathbb{1}$. Si ha:

$$\int_{t_0}^t \frac{dT_S(\tau,t_0)}{d\tau}d\tau = -\frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^t \mathcal{H}_S(\tau)T_S(\tau,t_0)d\tau$$

ovvero

$$\int_{t_0}^t dT_S(\tau,t_0) = -\frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^t \mathcal{H}_S(\tau)T_S(\tau,t_0)d\tau$$

$$T_S(t,t_0) - T_S(t_0,t_0) = -\frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^t \mathcal{H}_S(\tau)T_S(\tau,t_0)d\tau$$

Si ottiene così

$$T_S(t,t_0) = \mathbb{1} - \frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^t \mathcal{H}(\tau)T_S(\tau,t_0)d\tau \tag{A16}$$

La (A16) può essere risolta esattamente solo in pochi casi. Una soluzione approssimata può essere ottenuta considerando un numero finito di termini della serie

$$T_S(t,t_0) = \sum_{n=0}^{\infty} T_{Sn}(t,t_0) \tag{A17}$$

con

$$T_{S0} = \mathbb{1} \quad ; \quad T_{Sn}(t,t_0) = -\frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t} \mathcal{H}(t_1) T_{S\,n-1}(t_1,t_0)dt_1 \tag{A18}$$

Risolvendo questa equazione recursiva si ottiene, per $n = 1$:

$$T_{S1}(t,t_0) = -\frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t} \mathcal{H}(t_1) T_{S0} dt_1 = -\frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t} \mathcal{H}(t_1) dt_1 \quad ; \quad t_1 < t \tag{A19}$$

Per $n = 2$:

$$T_{S2}(t,t_0) = -\frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t} \mathcal{H}(t_1) T_{S1}(t_1,t_0) dt_1$$

Ma si ha

$$T_{S1}(t_1,t_0) = -\frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t_1} \mathcal{H}(t_2) dt_2 \quad ; \quad t_2 < t_1 < t$$

perciò

$$T_{S2}(t,t_0) = -\frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t} \mathcal{H}(t_1)(-\frac{i}{\hbar})\int_{t_0}^{t_1} \mathcal{H}(t_2) dt_2 dt_1 = \frac{(-i)^2}{\hbar^2}\int_{t_0}^{t} \mathcal{H}(t_1)\int_{t_0}^{t_1} \mathcal{H}(t_2) dt_2 dt_1 \tag{A20}$$

Per $n = 3$:

$$T_{S3}(t,t_0) = -\frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t} \mathcal{H}(t_1) T_{S2}(t_1,t_0) dt_1$$

Ma si ha

$$T_{S2}(t_1,t_0) = \frac{(-i)^2}{\hbar^2}\int_{t_0}^{t_1} \mathcal{H}(t_2)\int_{t_0}^{t_2} \mathcal{H}(t_3) dt_3 dt_2 \quad ; \quad t_3 < t_2 < t_1 < t$$

perciò

$$T_{S3}(t,t_0) = \frac{(-i)^3}{\hbar^3}\int_{t_0}^{t} \mathcal{H}(t_1)\int_{t_0}^{t_1} \mathcal{H}(t_2)\int_{t_0}^{t_2} \mathcal{H}(t_3) dt_3 dt_2 dt_1 \tag{A21}$$

e con procedimento analogo si ottiene, per $n = 4$:

$$\begin{aligned} T_{S4}(t,t_0) &= -\frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t} \mathcal{H}(t_1) T_{S3}(t_1,t_0) dt_1 \\ &= \frac{(-i)^4}{\hbar^4}\int_{t_0}^{t} \mathcal{H}(t_1)\int_{t_0}^{t_1} \mathcal{H}(t_2)\int_{t_0}^{t_2} \mathcal{H}(t_3)\int_{t_0}^{t_3} \mathcal{H}(t_4) dt_4 dt_3 dt_2 dt_1 \end{aligned} \tag{A22}$$

e così via, perciò in definitiva la (A17) diviene

$$T_S(t,t_0) = \mathbb{1} + \sum_{n=1}^{\infty}\Big(-\frac{i}{\hbar}\Big)^n \int_{t_0}^{t} \mathcal{H}(t_1)\int_{t_0}^{t_1} \mathcal{H}(t_2)\cdots\int_{t_0}^{t_{n-1}} \mathcal{H}(t_n) dt_n dt_{n-1}\cdots dt_1$$

ovvero

$$T_S(t,t_0) = \mathbb{1} + \sum_{n=1}^{\infty}\Big(-\frac{i}{\hbar}\Big)^n \int_{t_0}^{t} dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 \cdots \int_{t_0}^{t_{n-1}} dt_n \mathcal{H}(t_1)\mathcal{H}(t_2)\cdots\mathcal{H}(t_n) \tag{A23}$$

con

$$t_n < t_{n-1} < \cdots < t_2 < t_1 < t \tag{A24}$$

Esplicitamente si ha:

$$\begin{aligned} T_S(t,t_0) = \mathbb{1} - \frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t} \mathcal{H}(t_1)dt_1 + \\ + \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^2 \int_{t_0}^{t} dt_1 \int_{t_0}^{t_1} \mathcal{H}(t_1)\mathcal{H}(t_2)dt_2 + \\ + \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^3 \int_{t_0}^{t} dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 \int_{t_0}^{t_2} \mathcal{H}(t_1)\mathcal{H}(t_2)\mathcal{H}(t_3)dt_3 + \\ + \dots \end{aligned} \tag{A25}$$

L'ordine in cui gli integrandi sono scritti è importante, perché $[\mathcal{H}(t_k), \mathcal{H}(t_l)]$ è in generale diverso da zero per $k \neq l$.

Ricordando la proprietà gruppale (A7) si può scrivere la (A2) nel modo seguente:

$$|\chi(t)\rangle = T_S\left(t, t_0 + (n-1)\frac{\triangle t}{n}\right)\cdots T_S\left(t_0 + 2\frac{\triangle t}{n}, t_0 + \frac{\triangle t}{n}\right) T_S\left(t_0 + \frac{\triangle t}{n}, t_0\right)|\chi(t_0)\rangle \tag{A26}$$

dove $\triangle t = t - t_0$.
Abbiamo così ottenuto $T_S(t,t_0)$ come composizione di n operatori lineari ciascuno dei quali, per ogni $t_k = t_0 + k\triangle t/n$, opera su $|\chi(t_k)\rangle$ generando $|\chi(t_k + \triangle t/n)\rangle$.
Per semplificare la scrittura conviene porre

$$T_S\left(t_0 + k\frac{\triangle t}{n}, t_0 + (k-1)\frac{\triangle t}{n}\right) = T_S(t_k, t_{k-1}) \quad ; \quad k = 1, \dots, n \quad ; \quad t_n \equiv t$$

cosicché la (A26) diviene

$$|\chi(t)\rangle = T_S(t, t_{n-1})\cdots T_S(t_2, t_1)T_S(t_1, t_0)|\chi(t_0)\rangle \tag{A27}$$

Ora riprendiamo in considerazione la (A12) dove, in luogo di $t' = t + \triangle t$, poniamo $t_k = t_{k-1} + \frac{\triangle t}{n}$ cosicché la (A12) diviene

$$T_S(t_k, t_{k-1}) = \mathbb{1} - \frac{i}{\hbar}\frac{\triangle t}{n}\mathcal{H}_S(t_{k-1}) + \cdots$$

e quindi la (A27) diviene

$$\begin{aligned} |\chi(t)\rangle = \left(\mathbb{1} - \frac{i}{\hbar}\frac{\triangle t}{n}\mathcal{H}_S(t_{n-1}) + \cdots\right)\cdots \\ \cdots\left(\mathbb{1} - \frac{i}{\hbar}\frac{\triangle t}{n}\mathcal{H}_S(t_1) + \cdots\right)\left(\mathbb{1} - \frac{i}{\hbar}\frac{\triangle t}{n}\mathcal{H}_S(t_0) + \cdots\right)|\chi(t_0)\rangle \end{aligned} \tag{A28}$$

Se $\mathcal{H}_S$ non dipende esplicitamente dal tempo si ha

$$\mathcal{H}_S(t_{n-1}) = \ldots = \mathcal{H}_S(t_1) = \mathcal{H}_S(t_0) = \mathcal{H}_S$$

perciò se $\triangle t/n$ è abbastanza piccolo possiamo scrivere, trascurando gli infinitesimi di ordine superiore:

$$|\chi(t)\rangle = \left(\mathbb{1} - \frac{i}{\hbar}\frac{\triangle t}{n}\mathcal{H}_S\right)^n |\chi(t_0)\rangle$$

Se n tende all'infinito si ha, per definizione del "numero di Nepero" $e^w = \lim_{n\to\infty}(1 + \frac{w}{n})^n$,

$$|\chi(t)\rangle = \lim_{n\to\infty}\left(\mathbb{1} + \frac{-\frac{i}{\hbar}(t-t_0)\mathcal{H}_S}{n}\right)^n |\chi(t_0)\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar}(t-t_0)\mathcal{H}_S}|\chi(t_0)\rangle \tag{A29}$$

perciò in definitiva si ottiene:

$$|\chi(t)\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar}(t-t_0)\mathcal{H}_S}|\chi(t_0)\rangle \quad ; \quad T_S(t,t_0) = e^{-\frac{i}{\hbar}(t-t_0)\mathcal{H}_S} \tag{A30}$$

Per inciso, osserviamo che se $\mathcal{H}_S$ non dipende esplicitamente dal tempo, allora la (A30) si può ottenere semplicemente integrando la (A10) che qui riscriviamo:

$$\frac{d|\chi(t)\rangle}{dt} = -\frac{i}{\hbar}\mathcal{H}_S|\chi(t)\rangle$$

L'integrale è

$$|\chi(t)\rangle = Ce^{-\frac{i}{\hbar}t\mathcal{H}_S}$$

dove C è una costante di integrazione. Per $t = t_0$ si ha

$$|\chi(t_0)\rangle = Ce^{-\frac{i}{\hbar}t_0\mathcal{H}_S}$$

da cui

$$C = e^{\frac{i}{\hbar}t_0\mathcal{H}_S}|\chi(t_0)\rangle$$

perciò

$$|\chi(t)\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar}(t-t_0)\mathcal{H}_S}|\chi(t_0)\rangle$$

Abbiamo così ottenuto la soluzione dell'equazione di Schrödinger per un sistema meccanico in cui $\mathcal{H}_S$ non dipende esplicitamente dal tempo; questo fatto rende l'espressione di T_S (v. eq. (A30)) assai più semplice della (A25).

Appendice B

L'INTEGRALE DI PERCORSO DI FEYNMAN

Riprendiamo in considerazione la (A27):

$$|\chi(t)\rangle = T_S(t, t_{n-1}) \cdots T_S(t_2, t_1) T_S(t_1, t_0) |\chi(t_0)\rangle \tag{B1}$$

Rappresentiamola nelle coordinate

$$\langle q(t)|\chi(t)\rangle = \langle q(t)|T_S(t, t_{n-1}) \cdots T_S(t_2, t_1) T_S(t_1, t_0)|\chi(t_0)\rangle$$

e inseriamo le n relazioni di chiusura

$$\int |q(t_k)\rangle\langle q(t_k)| dq(t_k) = \mathbb{1} \quad ; \quad k = 0, \ldots, n-1 \tag{B2}$$

Si ha così ($t \equiv t_n$):

$$\langle q(t)|\chi(t)\rangle = \int \cdots \int \langle q(t)|T_S(t, t_{n-1})|q(t_{n-1})\rangle\langle q(t_{n-1})|T_S(t_{n-1}, t_{n-2}) \cdots$$
$$\cdots \langle q(t_2)|T_S(t_2, t_1)|q(t_1)\rangle\langle q(t_1)|T_S(t_1, t_0)|q(t_0)\rangle\langle q(t_0)|\chi(t_0)\rangle dq(t_{n-1}) \cdots dq(t_0)$$

ovvero

$$\psi(q, t) = \int \prod_{k=0}^{n-1} \langle q(t_{k+1})|T_S(t_{k+1}, t_k)|q(t_k)\rangle dq(t_k) \psi(q_0, t_0)$$

Tenendo presenti le relazioni di chiusura

$$\int |p(t_k)\rangle\langle p(t_k)| dp(t_k) = \mathbb{1} \quad ; \quad k = 0, \ldots, n-1$$

segue

$$\psi(q, t) = \iint \prod_{k=0}^{n-1} \langle q(t_{k+1})|p(t_k)\rangle\langle p(t_k)|T_S(t_{k+1}, t_k)|q(t_k)\rangle dq(t_k) dp(t_k) \psi(q_0, t_0)$$

Tenendo conto dell'eq. (990) dello studio (a) che qui riportiamo:

$$\langle q|p\rangle = \frac{e^{\frac{i}{\hbar} qp}}{\sqrt{\hbar}} \tag{B3}$$

si può scrivere

$$\psi(q, t) = \iint \prod_{k=0}^{n-1} \frac{1}{\sqrt{\hbar}} e^{\frac{i}{\hbar} q(t_{k+1}) p(t_k)} \langle p(t_k)|T_S(t_{k+1}, t_k)|q(t_k)\rangle dq(t_k) dp(t_k) \psi(q_0, t_0) \tag{B4}$$

Se ora assumiamo che l'hamiltoniana del sistema fisico che stiamo considerando non dipenda esplicitamente dal tempo possiamo fare uso della (A30) dell'Appendice A

$$T_S(t_{k+1}, t_k) = e^{-\frac{i}{\hbar} \mathcal{H}_S\big(q(t_k), p(t_k)\big) \triangle t} \quad ; \quad \triangle t = t_{k+1} - t_k \tag{B5}$$

e quindi si può scrivere

$$\langle p(t_k)|T_S(t_{k+1},t_k)|q(t_k)\rangle = \langle p(t_k)|e^{-\frac{i}{\hbar}\mathcal{H}_S\left(q(t_k),p(t_k)\right)\triangle t}|q(t_k)\rangle$$

Ora inseriamo la (B2) cosicché

$$\langle p(t_k)|T_S(t_{k+1},t_k)|q(t_k)\rangle = \int \langle p(t_k)|q'(t_k)\rangle\langle q'(t_k)|e^{-\frac{i}{\hbar}\mathcal{H}_S(q(t_k),p(t_k))\triangle t}|q(t_k)\rangle dq'(t_k)$$

e teniamo nuovamente conto della (B3) che ora riscriviamo così: $\langle p|q\rangle = \langle q|p\rangle^* = e^{-\frac{i}{\hbar}qp}/\sqrt{h}$

$$\langle p(t_k)|T_S(t_{k+1},t_k)|q(t_k)\rangle =$$

$$= \frac{1}{\sqrt{h}}\int e^{-\frac{i}{\hbar}q'(t_k)p(t_k)}\langle q'(t_k)|e^{-\frac{i}{\hbar}\mathcal{H}_S\left(q(t_k),p(t_k)\right)\triangle t}|q(t_k)\rangle dq'(t_k)$$

Ora occorre ricordare la (870) dello studio (a) che qui riscriviamo:

$$\langle s_a|A|s_b\rangle = A\delta(s_a - s_b)$$

dove A è un operatore. Possiamo così scrivere (argomento di $\mathcal{H}_S\big(q(t_k),p(t_k)\big)$ omesso per semplicità)

$$\langle p(t_k)|T_S(t_{k+1},t_k)|q(t_k)\rangle = \frac{1}{\sqrt{h}}\int e^{-\frac{i}{\hbar}q'(t_k)p(t_k)}e^{-\frac{i}{\hbar}\mathcal{H}_S\triangle t}\delta(q'(t_k)-q(t_k))dq'(t_k)$$

e infine

$$\langle p(t_k)|T_S(t_{k+1},t_k)|q(t_k)\rangle = \frac{1}{\sqrt{h}}e^{-\frac{i}{\hbar}q(t_k)p(t_k)}e^{-\frac{i}{\hbar}\mathcal{H}_S\triangle t}$$

Inserendo quest'ultima nella (B4) si ottiene

$$\begin{aligned}
\psi(q,t) &= \iint \prod_{k=1}^{n-1}\frac{1}{\sqrt{h}}e^{\frac{i}{\hbar}\big(q(t_{k+1})-q(t_k)\big)p(t_k)}\frac{1}{\sqrt{h}}e^{-\frac{i}{\hbar}\mathcal{H}_S\triangle t}dq(t_k)dp(t_k)\psi(q_0,t_0)\\
&= \iint \prod_{k=1}^{n-1}\frac{1}{\sqrt{h}}e^{\frac{i}{\hbar}\frac{\big(q(t_k+\triangle t)-q(t_k)\big)}{\triangle t}p(t_k)\triangle t}\frac{1}{\sqrt{h}}e^{-\frac{i}{\hbar}\mathcal{H}_S\triangle t}dq(t_k)dp(t_k)\psi(q_0,t_0)\\
&= \iint \prod_{k=1}^{n-1}\frac{1}{h}e^{\frac{i}{\hbar}\dot{q}(t_k)p(t_k)\triangle t}e^{-\frac{i}{\hbar}\mathcal{H}_S\triangle t}dq(t_k)dp(t_k)\psi(q_0,t_0)
\end{aligned}$$

da cui

$$\psi(q,t) = \iint \prod_{k=1}^{n-1}\frac{1}{h}e^{\frac{i}{\hbar}\big(\dot{q}(t_k)p(t_k)-\mathcal{H}_S\big)\triangle t}dq(t_k)dp(t_k)\psi(q_0,t_0)$$

e infine, ricordando la (K83) dell'Appendice K dello studio (a) che qui riscriviamo

$$\mathcal{H}_S(q,p) = p_k\dot{q}^k - \mathcal{L}(q,\dot{q})$$

possiamo definire

$$\mathcal{L}(q,\dot{q}) = \dot{q}p - \mathcal{H}_S(q,p)$$

cosicché

$$\psi(q,t) = \iint \prod_{k=1}^{n-1} \frac{1}{h} e^{\frac{i}{\hbar}\mathcal{L}\big(q(t_k),\dot{q}(t_k)\big)\triangle t} dq(t_k)dp(t_k)\psi(q_0,t_0)$$

Tenendo presente la definizione di "azione di Hamilton" espressa dalla (K46) dell'Appendice K dello studio (a) che qui riscriviamo

$$\mathcal{S} = \int \mathcal{L}(q,\dot{q})dt = \int \big(\dot{q}p - \mathcal{H}_S(q,p)\big)dt$$

si ottiene infine

$$\psi(q,t) = \iint \prod_{k=1}^{n-1} \frac{1}{h} e^{\frac{i}{\hbar}\mathcal{S}\big(q(t_k),p(t_k)\big)} dq(t_k)dp(t_k)\psi(q_0,t_0) \tag{B6}$$

L'espressione

$$\iint \prod_{k=1}^{n-1} \frac{1}{h} e^{\frac{i}{\hbar}\mathcal{S}\big(q(t_k),p(t_k)\big)} dq(t_k)dp(t_k) \tag{B7}$$

dedotta sulla base dell'assunzione che l'hamiltoniana $\mathcal{H}_S$ non dipenda esplicitamente dal tempo, è il propagatore da $\psi(q_0,t_0)$ a $\psi(q,t)$.
La (B6) è nota come *integrale di percorso (o integrale sui cammini) di Feynman.*

Esempio.

Per $n=3$ si ha

$$\psi(q,t) = \iint \prod_{k=1}^{2} \frac{1}{h} e^{\frac{i}{\hbar}\mathcal{S}} dq(t_k)dp(t_k)\psi(q_0,t_0)$$

ovvero

$$\psi(q,t) = \frac{1}{h^2} \iiiint e^{\frac{i}{\hbar}\mathcal{S}\big(q(t_2),p(t_2)\big)} dq(t_2)dp(t_2) e^{\frac{i}{\hbar}\mathcal{S}\big(q(t_1),p(t_1)\big)} dq(t_1)dp(t_1)\psi(q_0,t_0)$$