อินทิกรัลตามเส้นทางสำหรับอะตอมไฮโดรเจน

นายนิคม ชูศิริ

ศูนย์วิทยทรัพยากร
จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

วิทยานิพนธ์นี้เป็นส่วนหนึ่งของการศึกษาตามหลักสูตรปริญญาวิทยาศาสตรมหาบัณฑิต
ภาควิชาฟิสิกส์
บัณฑิตวิทยาลัย จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย
พ.ศ. 2526

ISBN 974-563-069-1

013323

I15950931

Path Integrals for Hydrogen Atom

Mr. Nikom Choosiri

ศูนย์วิทยทรัพยากร
จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

A Thesis Submitted in Partial Fulfillment of the Requirements

for the Degree of Master of Science

Department of Physics

Graduate School

Chulalongkorn University

1983

ISBN 974-563-069-1

Thesis Title	Path Integrals for Hydrogen Atom
By	Mr. Nikom Choosiri
Department	Physics
Thesis Advisor	Professor Virulh Sa-yakanit, F.D.

Accepted by the Graduate School, Chulalongkorn University in Partial fulfillment of the Requirements for the Master's degree.

S.T. Bunnag .....Dean of Graduate School

(Associate Professor Supradit Bunnag, Ph.D.)

Thesis Committee

Kitt Visoottiviseth .....Chairman

(Associate Professor Kitt Visoottiviseth, Ph.D.)

Pisistha Ratanavararaksa .....Member

(Assistant Professor Pisistha Ratanavararaksa, Ph.D.)

..... Member

(Assistant Professor Pornchai Pacharin-tanakun, Ph.D.)

Virulh Sa-yakanit ..... Member

(Professor Virulh Sa-yakanit, F.D.)

Copyright of the Graduate School, Chulalongkorn University

หัวข้อวิทยานิพนธ์ อินทิกรัลตามเส้นทางสำหรับอะตอมไฮโดรเจน
ชื่อนิสิต นายนิคม ชูศิริ
อาจารย์ที่ปรึกษา ศาสตราจารย์ ดร.วิรุฬห์ สายคณิต
ภาควิชา ฟิสิกส์
ปีการศึกษา 2526

พอสมุดกลาง สถาบันวิทยบริการ จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

บทคัดย่อ

วิทยานิพนธ์นี้ศึกษาปัญหาของอะตอมไฮโดรเจนโดยวิธีอินทิกรัลตามเส้นทางของฟายน์แมนด้วยสองวิธีการคืออินทิกรัลตามเส้นทางแบบลากรางเกียนและแบบแฮมิลโทเนียน

ขั้นแรกเราศึกษาอินทิกรัลตามเส้นทางของอะตอมไฮโดรเจนในสองมิติจากนั้นจึงแปลงอินทิกรัลตามเส้นทางนี้ให้อยู่ในรูปอินทิกรัลตามเส้นทางของออสซิลเลเตอร์ในสองมิติ ขั้นตอนในการแปลงประกอบด้วยสองขั้นตอนคือ การเปลี่ยนตัวแปรเวลาเสียใหม่และการเปลี่ยนโคออร์ดิเนตเสียใหม่โดยใช้การแปลงแบบเลวิ-ชิวิทาซึ่งเปลี่ยนโคออร์ดิเนตคาร์ทีเซียนเป็นโคออร์ดิเนตพาราโบลิกทำให้เราได้กรีนส์ฟังก์ชันและสเปกตรัมของพลังงานที่แน่นอนของอะตอมไฮโดรเจนในสองมิติ

ขั้นที่สองหลักการแปลงอินทิกรัลตามเส้นทางสำหรับปัญหาในสองมิตินี้เรานำมาใช้ศึกษาปัญหาของอะตอมไฮโดรเจนในสามมิติ การเปลี่ยนตัวแปรเวลายังคงนำมาใช้เช่นเดิม แต่เนื่องจากการเปลี่ยนตัวแปรโคออร์ดิเนตแบบเลวิ-ชิวิทาไม่มีในสามมิติ ดังนั้นการแปลงแบบคัสตาแอนอิโม-สเตเฟลซึ่งเปลี่ยนตัวแปรคาร์ทีเซียนในสามมิติเป็นตัวแปรคาร์ทีเซียนในสี่มิติจึงได้ถูกนำมาขยายเพื่อเปลี่ยนอินทิกรัลตามเส้นทางของปัญหาคูลอมบ์ในสามมิติเป็นอินทิกรัลตามเส้นทางของออสซิลเลเตอร์ในสี่มิติซึ่งอินทิกรัลตามเส้นทางของออสซิลเลเตอร์ เราสามารถกระทำได้พบว่ากรีนส์ฟังก์ชันในสามมิติคือ

$$G(\vec{x}'',\vec{x}';E) = \frac{mi}{2\pi\hbar}\frac{\Gamma(P+1)}{|\vec{x}''-\vec{x}'|} \det \begin{vmatrix} M_{-P,\frac{1}{2}}(-ika) & W_{-P,\frac{1}{2}}(-ikb) \\ M'_{-P,\frac{1}{2}}(-ika) & W'_{-P,\frac{1}{2}}(-ikb) \end{vmatrix}$$

จากกรีนส์ฟังก์ชันในสามมิติที่ได้เรา สามารถ ใช้คำนวณหาระดับพลังงานและฟังก์ชันคลื่นของอะตอมไฮโดรเจนในสามมิติด้วย

ศูนย์วิทยทรัพยากร
จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

Thesis Title Path Integrals for Hydrogen Atom

Name Mr. Nikom Choosiri

Thesis Advisor Professor Virulh Sa-yakanit , F.D.

Department Physics

Acadamic Year 1983

ABSTRACT

The hydrogen atom problem is studied by means of Feynman path integral using both Lagrangian and Hamiltonian path integral approach.

First, the path integral for the two dimensional hydrogen atom problem is reduced to the exactly solvable path integral for an oscillator in two dimensions. The reduction procedure consists of two key steps, the path dependent time rescaling and the Levi-Civita transformation which transforms Cartesian coordinates into parabolic coordinates. The Green's function and the energy spectrum of the hydrogen atom in two dimensions are obtained exactly.

Secondly, the reduction procedure is then generalized to solve the hydrogen atom problem in three dimensions. The same time rescaling is used. Since there is no Levi-Civita transformation in three dimensions, the modified Kustaanheimo-Stiefel transformation which maps Cartesian variables in three dimensions onto Cartesian variables in four dimensions, is used to transform the Coulomb path integral in three dimensions into an oscillator path integral in four dimensions.

Then the path integral can be performed exactly. The Green's function in three dimensions is

$$G(\vec{x}'',\vec{x}';E) = \frac{mi}{2\pi\hbar}\frac{\Gamma(p+1)}{|\vec{x}''-\vec{x}'|}\det \begin{vmatrix} M_{-P,\frac{1}{2}}(-ika) & W_{-P,\frac{1}{2}}(-ikb) \\ M'_{-P,\frac{1}{2}}(-ika) & W'_{-P,\frac{1}{2}}(-ikb) \end{vmatrix}$$

From the exact Green's function, the energy levels and the wave functions of the hydrogen atom in three dimensions are derived.

ศูนย์วิทยทรัพยากร
จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

หอสมุดกลาง สถาบันวิทยบริการ จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

ACKNOWLEDGEMENTS

The author wishes to express his appreciation to Dr. Virulh Sa-yakani for his advice, guidance and encouragement throughout this work. Finally he would like to thank all colleagues at the department of Physics for their helps in various ways.

ศูนย์วิทยทรัพยากร
จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

TABLE OF CONTENTS

Page

ABSTRACT iv

ACKNOWLEDGEMENTS viii

LIST OF ILLUSTRATIONS xi

CHAPTER I INTRODUCTION : HISTORICAL REVIEW AND FEYNMAN ... 1

PROPAGATOR 1

1.1 Introduction and Historical Review 1

1.2 The Propagator and Feynman's Path-Integral.. 3

1.3 Path Integral of a Free Particle 8

1.4 The Harmonic Oscillator 9

CHAPTER II THE HYDROGEN ATOM IN TWO DIMENSIONS 14

2.1 Green's Funciton and Time Reparameterization. 14

2.2 The Levi-Civita Transformation and the Coulomb Green's function from the Lagrangian Path Integral 17

2.3 The Hamiltonian Path Integral 21

CHAPTER III THE HYDROGEN ATOM IN THREE DIMENSIONS 26

3.1 The Coulomb Path Integral in Three Dimensions 26

3.2 The Modified Kustaanheimo-Stiefel Transformation in Four Dimensions 28

3.3 The Lagrangian Path Integral in Four Dimensions 35

3.4 The Hamiltonian Path Integral in Four Dimensions 37

Page

CHAPTER IV THE ENERGY SPECTRUM OF HYDROGEN ATOM 43

4.1 The Energy Spectrum of Hydrogen Atom from the Two Dimensional Green's Function 43

4.2 The Four Dimensional Polar Coordinates 46

4.3 The Three Dimensional Coulomb Green's Function and the Energy Spectrum 51

CHAPTER V THE WAVE FUNCTIONS OF HYDROGEN ATOM 55

5.1 The Eigen Function Expansion of the Green's Function 55

5.2 The Wave Function of Hydrogen Atom in Three Dimensions 57

5.3 The Ground State and Excited State Wave Functions of Hydrogen Atom from the Coulomb Green's Function 58

CHAPTER VI CONCLUSION 67

6.1 Summary 67

6.2 Discussion and Conclusion 71

REFERENCES 76

VITA 79

LIST OF ILLUSTRATIONS

Page

Figure 1.1 The Sum Over Paths in One Dimension 7

Figure 1.2 The Difference between the Classical Path and Some Possible Alternative Paths..... 10

ศูนย์วิทยทรัพยากร
จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย