

Università degli Studi di Napoli “Federico II”

Scuola Politecnica e delle Scienze di Base
Area Didattica di Scienze Matematiche Fisiche e Naturali

Dipartimento di Fisica “Ettore Pancini”



Laurea triennale in Fisica

Oscillatore armonico a temperatura finita e modi di Matsubara

Relatori:

Prof. Luigi Rosa

Candidato:

Carmen Ferrara

Matricola N85000642

A.A. 2017/2018

A voi tre...

Indice

1	Oscillatore armonico quantistico	5
2	Oscillatore armonico all'equilibrio termodinamico	13
3	Modi di Matsubara dell'oscillatore armonico a temperatura finita	21

Introduzione

Scopo di questa tesi è lo studio dell'oscillatore armonico quantistico a temperatura finita.

Introdurremo, nel Capitolo 1, il concetto di oscillatore quantistico e lo studieremo a temperatura zero. Nel Capitolo 2 vedremo il comportamento dello stesso a temperature diverse da zero, facendo un confronto con l'oscillatore classico. La difficoltà nel considerare un sistema quantistico a temperature diverse dallo zero nasce dalla impossibilità di definire gli autostati di energia. Sarà quindi necessario lo studio della probabilità di distribuzione di un generico osservabile, con l'introduzione dell'operatore densità. Sarà quindi necessario introdurre il concetto di funzione di partizione Z , quantità che esprime le proprietà statistiche del nostro oscillatore all'equilibrio termodinamico. Gli osservabili termodinamici infatti, quali entropia, energia libera, energia totale, possono essere espresse in funzione di Z . Nel Capitolo 3 introdurremo il concetto di path-integral a temperatura finita e vedremo come l'interpretazione di Feynman sia perfettamente coerente.

Capitolo 1

Oscillatore armonico quantistico

L'oscillatore armonico è uno dei problemi più importanti della fisica teorica, in quanto ogni potenziale può essere approssimato da un potenziale armonico, attorno alla posizione di equilibrio. Se, classicamente, le quantità fondamentali per la descrizione di un sistema sono le coordinate generalizzate hamiltoniane x e p (x definisce lo spazio delle configurazioni del sistema, mentre p è il suo momento coniugato), in accordo con l'equazione di Halmiton-Jacobi, in meccanica quantistica tali coordinate vengono sostituite con gli operatori osservabili X e P :

$$[X, P] = i\hbar$$

In particolare, se classicamente il sistema ha energia totale:

$$E = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 \quad (1.1)$$

l'operatore Hamiltoniano del sistema sarà:

$$H = H(X, P) = \frac{P^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 X^2 \quad (1.2)$$

Considerando H indipendente dal tempo, lo studio si ridurrà alla semplice soluzione degli autovalori dell'equazione agli stati stazionari di Schrodinger:

$$H|\varphi\rangle = E|\varphi\rangle \quad (1.3)$$

che, scritta nella rappresentazione $|x\rangle$, diventa:

$$\left[\frac{-\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 \right] \varphi(x) = E\varphi(x) \quad (1.4)$$

Gli osservabili X e P sono grandezze dimensionali, possiamo tuttavia adimensionalizzarli, definendo gli osservabili:

$$\hat{X} = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} X \quad (1.5)$$

$$\hat{P} = \frac{1}{\sqrt{m\omega\hbar}} P. \quad (1.6)$$

Con questa nuova notazione avremo:

$$[\hat{X}, \hat{P}] = i \quad (1.7)$$

e l'Hamiltoniana:

$$H = \hat{H}\hbar\omega \quad (1.8)$$

con:

$$\hat{H} = \frac{1}{2} (\hat{X}^2 + \hat{P}^2) \quad (1.9)$$

$\hat{X}$ e $\hat{P}$ sono operatori che non commutano; pertanto per definire la loro somma in quadratura, è utile introdurre gli operatori a e $a^\dagger$:

$$a = \frac{1}{\sqrt{2}} (\hat{X} + i\hat{P}) \quad (1.10)$$

$$a^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}} (\hat{X} - i\hat{P}) \quad (1.11)$$

Gli operatori a e $a^\dagger$ non sono Hermitiani ma sono l'uno l'aggiunto dell'altro e non commutano fra loro, infatti:

$$[a, a^\dagger] = \frac{1}{2} [\hat{X} + i\hat{P}, \hat{X} - i\hat{P}] = 1 \quad (1.12)$$

D'altro canto:

$$a^\dagger a = \frac{1}{2} (\hat{X}^2 + \hat{P}^2 - 1) \quad (1.13)$$

L'Hamiltoniana pertanto:

$$\hat{H} = a^\dagger a + \frac{1}{2} \quad (1.14)$$

Indicando con N l'operatore **numero** tale che:

$$N = a^\dagger a \quad (1.15)$$

anch'esso Hermitiano, in accordo con l'equazione (1.14):

$$\hat{H} = N + \frac{1}{2} \quad (1.16)$$

e quindi gli autovettori di $\hat{H}$ sono autovettori di $\hat{N}$, e viceversa. Ricaviamo dunque un'equazione agli autovalori di N :

$$N|\varphi_\nu\rangle = \nu|\varphi_\nu\rangle \quad (1.17)$$

Risolvendo quest'equazione, si osserva che l'autovettore $|\varphi_\nu\rangle$ di N è anche autovettore di H , con autovalore

$$E_\nu = \left(\nu + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega : \quad (1.18)$$

e

$$H|\varphi_\nu\rangle = \left(\nu + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega|\varphi_\nu\rangle \quad (1.19)$$

Data l'azione dunque dei commutatori a e $a^\dagger$, lo spettro di N contiene solo interi positivi, quindi gli autovalori di H sono:

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega \quad (1.20)$$

con $n=0,1,2,\dots$. Pertanto l'energia di un oscillatore armonico è quantizzata e non può avere valori arbitrari; inoltre il valore dell'energia allo stato fondamentale non è più 0 come nel caso classico, ma $\frac{\hbar\omega}{2}$. Poiché N e H sono osservabili, i loro autovettori costituiscono una base nello spazio di Hilbert E_x , in quanto sia N che H costituiscono un C.S.C.O. (un insieme completo di osservabili compatibili) in E_x . Il vettore $|\varphi_0\rangle$ di autovalore $n = 0$ è un vettore di E_x , che soddisfa la relazione:

$$a|\varphi_0\rangle = 0 \quad (1.21)$$

Assumendo che $|\varphi_0\rangle$ sia normalizzato, l'indeterminazione si riduce solo al fattore di fase globale del tipo $e^{i\theta}$, con $\theta \in \mathbb{R}$; di conseguenza, il vettore $|\varphi_1\rangle$ corrisponderà all'autovalore $n = 1$ e sarà proporzionale a $a^\dagger|\varphi_0\rangle$:

$$|\varphi_1\rangle = c_1 a^\dagger |\varphi_0\rangle \quad (1.22)$$

Per determinare la costante c_1 imponiamo che l'autovettore $|\varphi_1\rangle$ sia normalizzato e che la fase relativa allo stesso sia reale e positiva; andando a calcolare la norma di $|\varphi_1\rangle$ avremo:

$$\langle\varphi_1|\varphi_1\rangle = |c_1|^2 \langle\varphi_0|(aa^\dagger)|\varphi_0\rangle = |c_1|^2 \langle\varphi_0|(a^\dagger a + 1)|\varphi_0\rangle \quad (1.23)$$

Poiché l'autostato $|\varphi_0\rangle$ è normalizzato ed è autostato di $N = a^\dagger a$ con autovalore $n = 0$, avremo dalla normalizzazione:

$$\langle\varphi_1|\varphi_1\rangle = |c_1|^2 = 1 \quad (1.24)$$

Quindi:

$$|\varphi_1\rangle = a^\dagger |\varphi_0\rangle \quad (1.25)$$

Possiamo quindi costruire $|\varphi_2\rangle$ da $|\varphi_1\rangle$:

$$|\varphi_2\rangle = c_2 a^\dagger |\varphi_1\rangle \quad (1.26)$$

Richiedendo poi la normalizzazione di $|\varphi_2\rangle$ e imponendo la fase reale e positiva:

$$\langle \varphi_2 | \varphi_2 \rangle = |c_2|^2 \langle \varphi_1 | a a^\dagger | \varphi_1 \rangle = |c_2|^2 \langle \varphi_1 | (a^\dagger a + 1) | \varphi_1 \rangle = 2|c_2|^2 = 1 \quad (1.27)$$

Di conseguenza:

$$|\varphi_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} a^\dagger |\varphi_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (a^\dagger)^2 |\varphi_0\rangle \quad (1.28)$$

Iterando il processo per ogni n , scegliendo sempre la stessa convenzione di fase $c_n = \frac{1}{\sqrt{n}}$, possiamo ottenere $|\varphi_n\rangle$ da $|\varphi_0\rangle$:

$$|\varphi_n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n}} (a^\dagger)^n |\varphi_0\rangle \quad (1.29)$$

Possiamo quindi concludere che l'azione degli operatori a e $a^\dagger$ è di distruzione e creazione (rispettivamente):

$$\begin{aligned} a^\dagger |\varphi_n\rangle &= \sqrt{n+1} |\varphi_{n+1}\rangle \\ a |\varphi_n\rangle &= \sqrt{n} |\varphi_{n-1}\rangle \end{aligned} \quad (1.30)$$

Poiché gli osservabili X e P sono definiti da a e $a^\dagger$, possiamo facilmente trovare le loro espressioni rispetto alla base delle $|\varphi_n\rangle$:

$$\begin{aligned} X |\varphi_n\rangle &= \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \frac{1}{\sqrt{2}} (a^\dagger + a) |\varphi_n\rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} [\sqrt{n+1} |\varphi_{n+1}\rangle + \sqrt{n} |\varphi_{n-1}\rangle] \\ P |\varphi_n\rangle &= \sqrt{m\hbar\omega} \frac{i}{\sqrt{2}} (a^\dagger - a) |\varphi_n\rangle = i \sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}} [\sqrt{n+1} |\varphi_{n+1}\rangle - \sqrt{n} |\varphi_{n-1}\rangle] \end{aligned} \quad (1.31)$$

Gli elementi di matrice di X e P sono quindi:

$$\begin{aligned} \langle \varphi_{n'} | X | \varphi_n \rangle &= \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} [\sqrt{n+1} \delta_{n',n+1} + \sqrt{n} \delta_{n',n-1}] \\ \langle \varphi_{n'} | P | \varphi_n \rangle &= i \sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}} [\sqrt{n+1} \delta_{n',n+1} - \sqrt{n} \delta_{n',n-1}] \end{aligned} \quad (1.32)$$

Le matrici di X e P sono hermitiane: la matrice di X è composta dalla somma dei primi due termini precedenti, mentre quella di P è proporzionale

alla loro differenza, e la presenza dell'unità immaginaria i lo evidenzia. Andiamo, dunque, a calcolare il loro valor medio in uno stato stazionario e la loro deviazione quadratica media, in modo da verificare la relazione di incertezza:

$$\begin{aligned}\langle \varphi_n | X | \varphi_n \rangle &= 0 \\ \langle \varphi_n | P | \varphi_n \rangle &= 0\end{aligned}\quad (1.33)$$

Per ottenere la loro deviazione quadratica media (errore sulla misura stessa degli osservabili), dovremo calcolare i valori medi di X^2 e P^2 :

$$\begin{aligned}(\Delta X)^2 &= \langle \varphi_n | X^2 | \varphi_n \rangle - (\langle \varphi_n | X | \varphi_n \rangle)^2 = \langle \varphi_n | X^2 | \varphi_n \rangle \\ (\Delta P)^2 &= \langle \varphi_n | P^2 | \varphi_n \rangle - (\langle \varphi_n | P | \varphi_n \rangle)^2 = \langle \varphi_n | P^2 | \varphi_n \rangle\end{aligned}\quad (1.34)$$

Tuttavia, dalle relazioni (1.5), (1.6) e (1.7) si ottiene:

$$\begin{aligned}X^2 &= \frac{\hbar}{2m\omega} (a^\dagger + a) (a^\dagger + a) \\ P^2 &= \frac{-\hbar m\omega}{2} (a^\dagger - a) (a^\dagger - a)\end{aligned}\quad (1.35)$$

I termini a^2 e $(a^\dagger)^2$ non contribuiscono agli elementi diagonali della matrice, inoltre:

$$\langle \varphi_n | (a^\dagger a + a a^\dagger) | \varphi_n \rangle = \langle \varphi_n | (2a^\dagger a + 1) | \varphi_n \rangle = 2n + 1 \quad (1.36)$$

e conseguentemente:

$$\begin{aligned}(\Delta X)^2 &= \langle \varphi_n | X^2 | \varphi_n \rangle = \left(n + \frac{1}{2}\right) \frac{\hbar}{m\omega} \\ (\Delta P)^2 &= \langle \varphi_n | P^2 | \varphi_n \rangle = \left(n + \frac{1}{2}\right) m\hbar\omega\end{aligned}\quad (1.37)$$

Il loro prodotto, quindi, è:

$$\Delta X \Delta P = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar \quad (1.38)$$

Allo stato fondamentale l'incertezza sulla misura è proprio $\frac{\hbar}{2}$, in accordo con il principio di indeterminazione di Heisenberg, mentre per $n \neq 0$ sarà comunque multipla di $\frac{\hbar}{2}$. Andando quindi a confrontare l'oscillatore armonico quantistico con quello classico, si osserva che nel caso classico, il valore di energia più basso si ottiene quando momento ed energia cinetica sono nulli, quindi per $x = 0$. Dal punto di vista quantistico, invece, lo stato di energia minima è l'autostato $|\varphi_0\rangle$, la cui energia, come è stato osservato, non è nulla bensì pari ad $\frac{\hbar}{2}$ e la funzione d'onda ad esso associata ha una definita estensione spaziale, caratterizzata da una deviazione quadratica media

$$\Delta X = \frac{\hbar}{2m\omega}.$$

Questa differenza tra il caso classico e il caso quantistico deriva per l'appunto dal principio di indeterminazione di Heisenberg, in quanto non possiamo minimizzare, contemporaneamente, l'energia cinetica e l'energia potenziale: lo stato fondamentale è una sorta di punto di incontro in quanto la somma delle due energie è la più piccola possibile. Nel caso particolare di un oscillatore armonico, è possibile stimare queste considerazioni e trovare l'ordine di grandezza dell'energia e l'estensione spaziale dello stato fondamentale, l'energia potenziale media sarà dell'ordine di:

$$\bar{V} \simeq \frac{1}{2}m\omega^2\xi^2 \quad (1.39)$$

Ma ΔP sarà così pari a $\frac{\hbar}{\xi}$ quindi l'energia cinetica sarà:

$$\bar{T} = \frac{\bar{p}^2}{2m} \simeq \frac{\hbar^2}{2m\xi^2} \quad (1.40)$$

L'ordine di grandezza dell'energia totale è:

$$\bar{E} = \bar{T} + \bar{V} \simeq \frac{\hbar^2}{2m\xi^2} + \frac{1}{2}m\omega^2\xi^2 \quad (1.41)$$

Si osserva graficamente che per piccoli valori di ξ , $\bar{T}$ prevale sull'energia

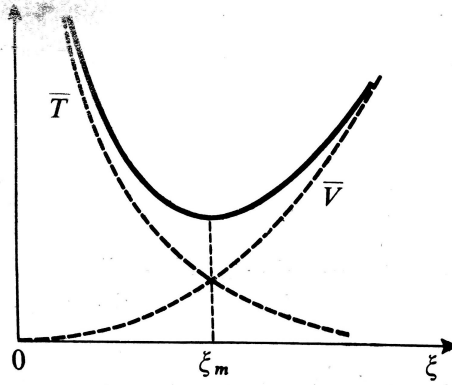


Figura 1.1: Confronto tra l'energia cinetica e l'energia potenziale per un oscillatore armonico a temperatura nulla

potenziale $\bar{V}$, mentre per ξ grande accade il contrario. Lo stato fondamentale corrisponde al minimo valore dell'energia, come si vede dal grafico, e quindi al minimo della funzione:

$$\xi_{min} \simeq \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \quad (1.42)$$

il che equivale a scrivere:

$$\bar{E} \simeq \hbar\omega \quad (1.43)$$

A causa del potenziale V , $\Delta X \Delta P$ raggiunge il valore minimo di $\frac{\hbar}{2}$ allo stato fondamentale $|\varphi_0\rangle$: la funzione d'onda, infatti, dell'oscillatore armonico, allo stato fondamentale, è una gaussiana.

$$\varphi_0(x) = \langle x|\varphi_0\rangle = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}} e^{-\frac{1}{2}\frac{m\omega x^2}{\hbar}} \quad (1.44)$$

Per avere le altre $\varphi_n(x)$ relative allo stato fondamentale, nella base $|x\rangle$, applichiamo il principio di corrispondenza tra le variabili x e p e gli osservabili X e P , con la notazione operatoriale di a e $a^\dagger$, ottenendo:

$$\varphi_n = \langle x|\varphi_n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}} \langle x|(a^\dagger)^n|\varphi_0\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}} \frac{1}{\sqrt{2^n}} \left[\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x - \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \frac{d}{dx} \right]^n \varphi_0(x) \quad (1.45)$$

che non è altro che:

$$\varphi_n(x) = \left[\frac{1}{2^n n!} \left(\frac{\hbar}{m\omega} \right)^n \right]^{\frac{1}{2}} \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar} \right)^{\frac{1}{4}} \left[\frac{m\omega}{\hbar} x - \frac{d}{dx} \right]^n e^{-\frac{1}{2}\frac{m\omega x^2}{\hbar}} \quad (1.46)$$

Quest'espressione di $\varphi_n(x)$ deriva da prodotto di $e^{-\frac{1}{2}\frac{m\omega x^2}{\hbar}}$ e un polinomio di grado n e parità $\pi = (-1)^n$ detto Polinomio di Hermite; andando a graficare la densità di probabilità associata alla funzione d'onda n -esima, in funzione della variabile x , si osserva all'aumentare di n , per $\varphi_n(x)$ che assume valori trascurabili, le curve si estendono più in larghezza. Ciò è dovuto al fatto che l'energia potenziale cresce con n , mentre $\varphi_n(x)$, per n grande, diminuisce, fino a diventare trascurabile nella regione dell'asse x in cui il potenziale $V(x)$ è grande. Conseguentemente, l'energia cinetica media della particella aumenta con n , poiché essa è data da:

$$\frac{1}{2m} \langle P^2 \rangle = -\frac{\hbar^2}{2m} \int_{-\infty}^{\infty} \varphi_n^*(x) \frac{d^2}{dx^2} \varphi_n(x) dx \quad (1.47)$$

Quando il numero di zeri di $\varphi_n(x)$ aumenta, aumenta anche la curvatura della funzione e la derivata seconda nell'equazione precedente sarà efficace solo per grandi valori di n . La probabilità di densità $|\varphi_n(x)|^2$ è elevata per $x \simeq \pm x_{min}$, dove x_{min} è l'ampiezza del moto classico di un oscillatore ad energia E_n . Nel caso quindi di un oscillatore armonico a temperatura pari allo 0 assoluto, lo stato del sistema è completamente determinato grazie alle autofunzioni relative agli autovalori dell'Hamiltoniana H . Questo tipo di oscillatore armonico si trova infatti in uno stato puro, cioè uno stato in cui la misura dell'osservabile dà come risultato degli autovalori n , con certe probabilità p corrispondenti a determinati autostati dell'operatore osservabile su

cui è stata fatta la misura. In particolare, in uno stato puro il sistema può essere descritto completamente sia da un vettore di stato che da un operatore che agisce in quel determinato spazio. Per descrivere, invece, l'oscillatore armonico ad equilibrio termodinamico, ad una temperatura diversa dallo 0 assoluto, si utilizza l'operatore densità ρ . Questo sistema, infatti, a differenza del precedente, è una miscela statistica di stati. In parole più semplici, in una miscela statistica di stati non conosciamo lo stato φ del sistema, ma sappiamo che esso ha determinate probabilità di essere uno fra tanti stati φ_n .

Capitolo 2

Oscillatore armonico all'equilibrio termodinamico

Consideriamo, in generale, un sistema all'equilibrio termodinamico alla temperatura assoluta T . L'operatore densità associato a tale sistema è:

$$\rho = Z^{-1} e^{\frac{H}{kT}} \quad (2.1)$$

dove H è l'operatore Hamiltoniano del sistema, k è la costante di Boltzmann e Z è un coefficiente di normalizzazione, scelto affinché la traccia della matrice di ρ sia pari ad 1:

$$Z = Tr[e^{\frac{H}{kT}}] \quad (2.2)$$

ed è detta funzione di partizione. Nella base degli autovettori di H , $|u_n\rangle$, avremo che:

$$\rho_{nn} = Z^{-1} \langle u_n | e^{\frac{H}{kT}} | u_n \rangle = Z^{-1} e^{\frac{E_n}{kT}} \quad (2.3)$$

mentre i termini non diagonali di ρ , i cosiddetti *coerenti*, sono:

$$\rho_{np} = Z^{-1} \langle u_n | e^{\frac{H}{kT}} | u_p \rangle = Z^{-1} e^{\frac{E_p}{kT}} \langle u_n | u_p \rangle = 0 \quad (2.4)$$

Quindi in un sistema generico, all'equilibrio termodinamico, la popolazione degli stati stazionari, cioè la probabilità di trovare il sistema nello stato $|u_n\rangle$, decresce esponenzialmente in funzione dell'energia, mentre la coerenza tra gli stati stazionari, cioè l'interferenza tra lo stato $|u_n\rangle$ e $|u_p\rangle$ che appare nel momento in cui andiamo a considerare una sovrapposizione lineare di stati coerenti, è nulla.

Riprendiamo, ora, il nostro oscillatore ad equilibrio termodinamico a temperatura T . Nel capitolo precedente, abbiamo detto che non si trova in uno stato puro, in quanto è impossibile descriverne lo stato con un ket $|\psi\rangle$, piuttosto esso rappresenta una miscela di stati quantistici e, quindi, le informazioni parziali che abbiamo ci consentono solo di dare un "peso" alle varie probabilità che descrivono i vari stati stazionari $|\varphi_n\rangle$. Abbiamo detto che il

corrispondente operatore densità può scriversi come:

$$\rho = Z^{-1} e^{-\frac{H}{kT}} \quad (2.5)$$

Z sarà sempre pari alla traccia dell'operatore $e^{-\frac{H}{kT}}$ mentre la traccia di ρ sarà unitaria:

$$Tr[\rho] = 1 \quad (2.6)$$

In prima battuta, in questo capitolo, andremo a calcolare il valore medio dell'energia dell'oscillatore, $\langle H \rangle$, interpretando i risultati ottenuti e, infine, troveremo l'espressione per la densità di probabilità della posizione della particella, cioè l'osservabile X che ci consentirà di caratterizzare il sistema. Abbiamo visto che le energie E_n degli stati $|\varphi_n\rangle$ sono pari a $(n + \frac{1}{2}) \hbar\omega$. Quindi potremo scrivere la funzione di partizione Z come:

$$Z = \sum_{n=0}^{\infty} \langle \varphi_n | e^{-\frac{H}{kT}} | \varphi_n \rangle = \sum_{n=0}^{\infty} e^{-(n+1/2)\hbar\omega/kT} = e^{-\hbar\omega/2kT} [1 + e^{-\hbar\omega/kT} + e^{-2\hbar\omega/kT} + \dots] \quad (2.7)$$

L'espressione tra parentesi è proprio la progressione geometrica di $e^{-\hbar\omega/kT}$ e quindi, sommando i termini:

$$Z = \frac{e^{-\hbar\omega/2kT}}{1 - e^{-\hbar\omega/kT}} \quad (2.8)$$

. In accordo con le proprietà dell'operatore ρ e con la 2.5, possiamo scrivere:

$$\langle H \rangle = Tr[H\rho] = Z^{-1} Tr[He^{-H/kT}] \quad (2.9)$$

Scrivendo esplicitamente la traccia nelle basi $|\varphi_n\rangle$, otteniamo:

$$\langle H \rangle = Z^{-1} \sum_{n=0}^{\infty} (n + 1/2) \hbar\omega e^{-(n+1/2)\hbar\omega/kT} \quad (2.10)$$

Per calcolare questa quantità, deriviamo ambo i membri rispetto a T :

$$\frac{dZ}{dT} = \frac{1}{kT^2} \sum_{n=0}^{\infty} (n + 1/2) \hbar\omega e^{-(n+1/2)\hbar\omega/kT} \quad (2.11)$$

Quindi, confrontando con l'equazione 2.10:

$$\langle H \rangle = kT^2 \frac{1}{Z} \frac{dZ}{dT} \quad (2.12)$$

Sostituendo nell'espressione precedente l'equazione 2.8, otteniamo il valor medio di H :

$$\langle H \rangle = \frac{\hbar\omega}{2} + \frac{\hbar\omega}{e^{\hbar\omega/kT} - 1} \quad (2.13)$$

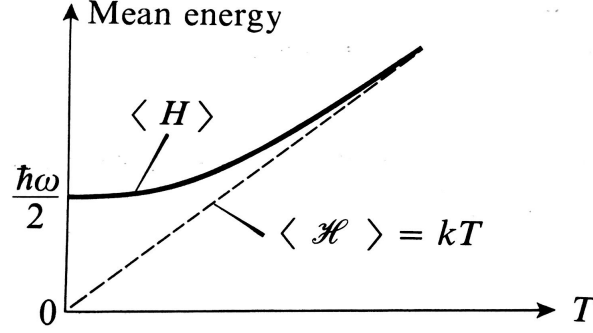


Figura 2.1: Variazione dell'energia media di oscillatore quantistico (linea continua) e dell'oscillatore armonico classico (linea tratteggiata), in funzione della temperatura

L'energia $\mathcal{H}$ di un oscillatore classico unidimensionale è:

$$\mathcal{H}(x, p) = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 \quad (2.14)$$

con p ed x che variano da $-\infty$ a $+\infty$; in accordo con la meccanica statistica classica, l'energia media di un oscillatore classico è:

$$\langle \mathcal{H} \rangle = \frac{\int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \mathcal{H}(x, p) e^{\mathcal{H}(x, p)/kT} dx dp}{\int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\mathcal{H}(x, p)/kT} dx dp} \quad (2.15)$$

Sostituendo la 2.14 nella 2.15, otteniamo che:

$$\langle \mathcal{H} \rangle = kT \quad (2.16)$$

Dal grafico si vede che per $T = 0$, $\langle H \rangle = \hbar\omega/2$. Questo risultato corrisponde al fatto che allo zero assoluto l'oscillatore si troverà sicuramente nello stato fondamentale $|\varphi_0\rangle$, con energia pari a $\hbar\omega/2$. L'oscillatore classico, invece, è in una posizione di equilibrio stabile e la sua energia media è nulla $\langle \mathcal{H} \rangle = 0$.

Finché $T \ll \hbar\omega$, è apprezzabile solo la popolazione nello stato fondamentale e $\langle H \rangle$ rimane uguale a $\hbar\omega/2$: la curva di $\langle H \rangle$ infatti ha una tangente

orizzontale. Per T piccolo:

$$\langle H \rangle \simeq \frac{\hbar\omega}{2} + \hbar\omega e^{-\hbar\omega/kT} \quad (2.17)$$

D'altra parte, aumentando la temperatura ($kT \gg \hbar\omega$), la stessa formula ci porta:

$$\langle H \rangle = \frac{\hbar\omega}{2} + kT \left(1 - \frac{1}{2} \frac{\hbar\omega}{kT} + \dots \right) \quad (2.18)$$

o ancora:

$$\langle H \rangle \simeq kT \quad (2.19)$$

al secondo ordine di infinitesimo di $kT \left(\frac{\hbar\omega}{kT} \right)^2$. L'asintoto della curva di $\langle H \rangle$ in funzione di T è proprio la retta dell'energia media classica $\langle H \rangle = kT$.

Quindi l'oscillatore armonico quantistico e l'oscillatore armonico classico hanno la stessa energia kT ad alte temperature. Le differenze si incontrano a basse temperature ($kT \lesssim \hbar\omega$): a questo livello, infatti, non è più possibile ignorare la quantizzazione dell'energia, in quanto la differenza rispetto a kT separa due livelli adiacenti dell'oscillatore.

Vediamo adesso la distribuzione di probabilità dell'osservabile X . Quando l'oscillatore armonico è nel n -esimo stato stazionario, la corrispondente densità di probabilità $\rho_n(x)$ è:

$$\rho_n(x) = |\varphi_n(x)|^2 = \langle x | \varphi_n \rangle \langle \varphi_n | x \rangle \quad (2.20)$$

All'equilibrio termodinamico, l'oscillatore è descritto da una miscela statistica di stati $|\varphi_n\rangle$ con i pesi: $Z^{-1}e^{-E_n/kT}$. La densità di probabilità $\rho(x)$ sarà dunque:

$$\rho(x) = Z^{-1} \sum_n \rho_n(x) e^{-E_n/kT} \quad (2.21)$$

$\rho(x)$ non è altro che, quindi, la somma pesata delle densità di probabilità $\rho_n(x)$ associate ai vari stati $|\varphi_n\rangle$.

La densità di probabilità è ovviamente legata all'operatore densità di un oscillatore armonico all'equilibrio termodinamico:

$$\rho(x) = Z^{-1} \sum_n e^{-E_n/kT} \langle x | \varphi_n \rangle \langle \varphi_n | x \rangle \quad (2.22)$$

D'altra parte facendo agire l'operatore $e^{-H/kT}$ possiamo vedere che:

$$e^{-H/kT} = e^{-H/kT} \sum_n |\varphi_n\rangle \langle \varphi_n| = \sum_n e^{-E_n/kT} |\varphi_n\rangle \langle \varphi_n| \quad (2.23)$$

e, quindi, otteniamo:

$$\rho(x) = Z^{-1} \langle x | e^{-H/kT} | x \rangle = \langle x | \rho | x \rangle \quad (2.24)$$

Pertanto, la $\rho(x)$ non è altro che l'elemento diagonale dell'operatore densità corrispondente al ket $|x\rangle$. Nel capitolo 1 abbiamo visto che l'Hamiltoniana di un oscillatore può scriversi in termini dell'operatore N :

$$H = \hbar\omega \left(a^\dagger a + \frac{1}{2} \right) \quad (2.25)$$

e dunque ponendo:

$$\lambda = \frac{\hbar\omega}{kT} \quad (2.26)$$

$$F_\lambda = \langle x | e^{-\lambda a^\dagger a} | x \rangle \quad (2.27)$$

potremo scrivere direttamente $\rho(x)$ come:

$$\rho(x) = Z^{-1} e^{-\frac{\lambda}{2}} F_\lambda(x) \quad (2.28)$$

Quindi, per calcolare $\rho(x)$ dovremo dapprima valutare l'elemento diagonale F_λ , e quindi calcolare la variazione di $F_\lambda(x)$ da x fino a $x + dx$. Dunque, il ket $|x + dx\rangle$ sarà dato:

$$|x + dx\rangle = \left(1 - i \frac{dx}{\hbar} P \right) |x\rangle \quad (2.29)$$

Approssimando quindi al secondo ordine rispetto in x :

$$F_\lambda(x + dx) = F_\lambda(x) + \frac{dx}{\hbar} \langle x | [P, e^{-\lambda a^\dagger a}] | x \rangle \quad (2.30)$$

In quest'equazione c'è l'operatore P proporzionale a $(a - a^\dagger)$; d'altro canto X è proporzionale a $(a + a^\dagger)$, che agisce direttamente sul ket $|x\rangle$. Dovremo quindi trasformare $[P, e^{-\lambda a^\dagger a}]$ per ottenere X . Iniziamo a ricercare una relazione tra $a e^{-\lambda a^\dagger a}$ e $e^{-\lambda a^\dagger a} a$ che può essere ottenuta abbastanza semplicemente nella rappresentazione $|\varphi_n\rangle$:

$$a e^{-\lambda a^\dagger a} |\varphi_n\rangle = \sqrt{n} e^{-\lambda n} |\varphi_{n-1}\rangle \quad (2.31)$$

$$e^{-\lambda a^\dagger a} |\varphi_n\rangle = \sqrt{n} e^{-\lambda(n-1)} |\varphi_{n-1}\rangle \quad (2.32)$$

il che equivale a scrivere:

$$e^{-\lambda a^\dagger a} a = e^\lambda a e^{-\lambda a^\dagger a} \quad (2.33)$$

che può essere ancora scritto come:

$$\left(1 - \tanh \frac{\lambda}{2}\right) e^{-\lambda a^\dagger a} a = \left(1 + \tanh \frac{\lambda}{2}\right) a e^{-\lambda a^\dagger a} \quad (2.34)$$

Similmente, si vede che:

$$e^{-\lambda a^\dagger a} a^\dagger = e^{-\lambda} a^\dagger e^{-\lambda a^\dagger a} \quad (2.35)$$

e quindi:

$$\left(1 + \tanh \frac{\lambda}{2}\right) e^{-\lambda a^\dagger a} a^\dagger = \left(1 - \tanh \frac{\lambda}{2}\right) a^\dagger e^{-\lambda a^\dagger a} \quad (2.36)$$

Sottraendo membro a membro la (2.36) e la (2.34), otteniamo:

$$[a - a^\dagger, e^{-\lambda a^\dagger a}] = -\tanh \frac{\lambda}{2} [a + a^\dagger, e^{-\lambda a^\dagger a}] \quad (2.37)$$

avendo applicato l'anticommutatore.

Otteniamo, quindi:

$$[P, e^{-\lambda a^\dagger a}] = im\omega \tanh \frac{\lambda}{2} [X, e^{-\lambda a^\dagger a}] \quad (2.38)$$

Sostituendo questo risultato nell'equazione 2.30, otteniamo:

$$F_\lambda(x+dx) - F_\lambda(x) = -\frac{m\omega}{\hbar} dx \tanh \frac{\lambda}{2} \langle x | [X, e^{-\lambda a^\dagger a}]_+ | x \rangle = -2x \frac{m\omega}{\hbar} \tanh \frac{\lambda}{2} F_\lambda(x) dx \quad (2.39)$$

$F_\lambda(x)$ soddisfa, dunque, l'equazione differenziale:

$$\frac{d}{dx} F_\lambda(x) + \frac{2x}{\xi^2} F_\lambda(x) = 0 \quad (2.40)$$

dove ξ , che ha le dimensioni di una lunghezza, è definita da:

$$\xi = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega} \coth \frac{\lambda}{2}} = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega} \coth \frac{\hbar\omega}{2kT}} \quad (2.41)$$

Possiamo integrare l'equazione differenziale direttamente, ottenendo:

$$F_\lambda(x) = F_\lambda(0) e^{-x^2/\xi^2} \quad (2.42)$$

$\rho(x)$, per come è stata definita nell'equazione 2.28, sarà:

$$\rho(x) = Z^{-1} e^{-\lambda/2} F_\lambda(0) e^{-x^2/\xi^2} \quad (2.43)$$

L'integrale di $\rho(x)$ sull'asse x dev'essere uguale a 1, otteniamo:

$$\rho(x) = \frac{1}{\xi\sqrt{\pi}} e^{-x^2/\xi^2} \quad (2.44)$$

La funzione ρ è una gaussiana, la cui larghezza è caratterizzata dalla lunghezza ξ . Partendo dalla densità di probabilità, possiamo calcolare il valor medio di X e l'errore sullo stesso $\langle \Delta X \rangle$:

$$\begin{aligned} \langle X \rangle &= 0 \\ \langle X^2 \rangle &= (\Delta X)^2 = \frac{\xi^2}{2} \end{aligned} \quad (2.45)$$

(ΔX) è pari a $\hbar/2m\omega$ quando $T = 0$: fissato questo valore di T , l'oscillatore è allo stato fondamentale e $\rho(x)$ è $|\varphi_0(x)|^2$; ΔX si trova con la radice quadratica media di X nello stato fondamentale. All'aumentare T , poi, aumenta anche ΔX e per $kT \gg \hbar\omega$:

$$(\Delta X)^2 \xrightarrow{T \rightarrow \infty} \frac{kT}{m\omega^2} \quad (2.46)$$

In questo caso, $\rho(x)$ coincide con la densità di probabilità dell'oscillatore classico all'equilibrio termodinamico a temperatura T :

$$\rho_{cl} = \frac{e^{-V(x)/kT}}{\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-V(x)/kT}} = \frac{1}{\sqrt{\frac{2\pi kT}{m\omega^2}}} e^{-\frac{m\omega^2 x^2}{2kT}} \quad (2.47)$$

che implica $\Delta X_{cl}^2 = kT/m\omega^2$: di nuovo i risultati quantistici e quelli classici si incontrano per temperature elevate, nel limite quindi $kT \gg \hbar\omega$.

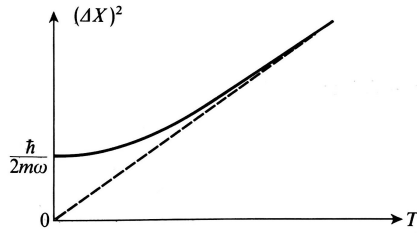


Figura 2.2: Variazione rispetto alla temperatura T di $(\Delta x)^2$ per un oscillatore armonico all'equilibrio termodinamico

I risultati così ottenuti possono essere applicati, ad esempio, al problema dello scioglimento di un corpo solido: gli esperimenti mostrano, infatti, che il corpo si scioglie quando ΔX è dell'ordine della distanza interatomica d . Quindi, la temperatura al punto di scioglimento è approssimativamente data

da:

$$\frac{\xi^2}{2d^2} \simeq \eta^2. \quad (2.48)$$

Sostituendo ξ con la 2.41, otteniamo una legge che espliciti il comportamento del solido rispetto alla temperatura T ; ponendo $T = T_f$ per $kT_f \gg \hbar\omega_E$:

$$\frac{kT_f}{m\omega_E^2} \simeq \eta^2 d^2 \quad (2.49)$$

Posto:

$$\hbar\omega_E = k\Theta_E \quad (2.50)$$

(Θ_E temperatura di Einstein) definita dalla relazione:

$$\Theta_E = \frac{h\nu}{k} \quad (2.51)$$

e se la distanza d non cambia apprezzabilmente da una sostanza ad un'altra, avremo in generale che:

$$\frac{T_f}{m\Theta_E^2} \simeq \text{cost} \quad (2.52)$$

Quindi, il punto di scioglimento di un cristallo è, approssimativamente, proporzionale al quadrato della frequenza dei moti vibrazionali, caratteristici del cristallo.

Capitolo 3

Modi di Matsubara dell'oscillatore armonico a temperatura finita

Nella tesi di dottorato, Richard Feynman propose una formulazione della meccanica quantistica secondo cui il propagatore di una particella tra il suo stato iniziale e quello finale è dato dall'integrale su tutti i cammini che la particella può percorrere spostandosi dalla configurazione iniziale a quella finale. L'idea fondamentale di Feynman è di associare un'ampiezza di probabilità ad ogni alternativa disgiunta relativa all'evento A in questione; nella formulazione standard si associa invece un'ampiezza di probabilità alla posizione di una particella ad un particolare istante. Tutta la teoria si basa sul fatto che le ampiezze quantistiche soddisfano il Principio di Sovrapposizione: l'ampiezza totale per l'evento A non è altro che la somma delle n ampiezze relative ad ogni singola alternativa disgiunta.

Abbiamo già visto che le proprietà di un sistema quanto-meccanico sono perfettamente determinate mediante lo studio della sua Hamiltoniana, che per una particella libera con spin 0 è:

$$\hat{H} = \frac{\hat{P}^2}{2m} + V(\hat{x})$$

e che la dinamica di uno stato $|\psi\rangle$ è governata dall'equazione di Schrodinger:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi\rangle = \hat{H} |\psi\rangle$$

Risolvere questa equazione significa trovare l'operatore di evoluzione temporale $\hat{U}(t, t_0)$ che propaga lo stato del sistema dal tempo t_0 ad un generico istante di tempo t :

$$|\psi(t)\rangle = \hat{U}(t, t_0) |\psi(t_0)\rangle$$

che per questo motivo è detto propagatore. La forma esplicita di tale operatore, applicato al caso di hamiltoniana indipendente dal tempo, è la seguente:

$$\hat{U}(t, t_0) = e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}(t-t_0)}$$

Nel limite della meccanica classica possiamo anche ricondurci al calcolo della Lagrangiana del sistema:

$$L = L_M = \frac{1}{2} m \dot{x}^2 - V(x) \quad (3.1)$$

dalla quale possiamo ottenere nuovamente l'Hamiltoniana mediante la trasformata di Legendre:

$$p \equiv \frac{\partial L_M}{\partial \dot{x}} \\ H = \dot{x}p - L_M = \frac{p^2}{2m} + V(x) \quad (3.2)$$

Abbiamo visto che per definire lo stato di un sistema possiamo usare diverse basi, come quella dell'energia:

$$\hat{H}|n\rangle = E_n|n\rangle$$

Andando a considerare l'oscillatore armonico con potenziale:

$$V(\hat{x}) \equiv \frac{1}{2} m \omega^2 x^2$$

si ottiene la soluzione agli autovalori che già abbiamo visto:

$$E_n = \hbar \omega \left(n + \frac{1}{2} \right) \quad n = 0, 1, 2, ..$$

Mettiamoci, adesso, nella base $|x\rangle$ tale che:

$$\begin{aligned} \langle x|\hat{x}|x'\rangle &= x\langle x|x'\rangle = x\delta(x-x') \\ \langle x|\hat{p}|x'\rangle &= -i\hbar\partial_x\langle x|x'\rangle = -i\hbar\partial_x\delta(x-x') \end{aligned} \quad (3.3)$$

Partendo da questo, possiamo vedere l'operatore $\hat{x}$ come operatore del campo $\hat{\phi}$ in un certo punto e scrivere la corrispondenza:

$$\hat{x} \longleftrightarrow \hat{\phi}(0) \quad (3.4)$$

Nella teoria dei campi, infatti, gli operatori sono scritti nella rappresentazione di Heisenberg:

$$\hat{x}_H \longleftrightarrow \hat{\phi}_H(t, 0) \quad (3.5)$$

In questa rappresentazione gli operatori (osservabili e altri) sono dipendenti dal tempo, mentre gli stati ne sono indipendenti, diversamente dalla rappresentazione di Schrodinger.

Consideriamo ora un generico sistema quanto-meccanico a temperatura finita T . Abbiamo visto nel Capitolo 2 che la quantità fondamentale che ci consente di descrivere questo sistema è la funzione di partizione Z . Considerando Z funzione della temperatura T e ponendo $k_B = 1$, la funzione di partizione Z è definita da:

$$Z(T) \equiv \text{Tr}[e^{-\beta\hat{H}}], \beta \equiv \frac{1}{T} \quad (3.6)$$

Da questa quantità gli altri operatori osservabili, come l'energia media E , l'entropia S e l'energia libera F , possono essere ottenuti con le relazioni:

$$F = -T \ln Z \quad (3.7)$$

$$S = -\frac{\partial F}{\partial T} = \ln Z + \frac{1}{TZ} \text{Tr}[\hat{H} e^{-\beta\hat{H}}] = -\frac{F}{T} + \frac{E}{T} \quad (3.8)$$

$$E = \frac{1}{Z} \text{Tr}[\hat{H} e^{-\beta\hat{H}}]. \quad (3.9)$$

Per un oscillatore armonico abbiamo visto (equazione 2.8):

$$Z = \sum_{n=0}^{\infty} \langle n | e^{-\beta\hat{H}} | n \rangle = \sum_{n=0}^{\infty} e^{-\beta\hbar\omega(\frac{1}{2}+n)} = \frac{e^{-\beta\hbar\omega/2}}{1 - e^{-\beta\hbar\omega}} = \frac{1}{2 \sinh(\frac{\hbar\omega}{2T})} \quad (3.10)$$

Conseguentemente:

$$F = T \ln \left(e^{\frac{\hbar\omega}{2T}} - e^{-\frac{\hbar\omega}{2T}} \right) = \frac{\hbar\omega}{2} + T \ln \left(1 - e^{-\beta\hbar\omega} \right)$$

$$\approx \begin{cases} \frac{\hbar\omega}{2} T \ll \hbar\omega, \\ -T \ln \left(\frac{T}{\hbar\omega} \right) T \gg \hbar\omega \end{cases} \quad (3.11)$$

Analogamente S:

$$S = -\ln \left(1 - e^{-\beta\hbar\omega} \right) + \frac{\hbar\omega}{T} \frac{1}{e^{\beta\hbar\omega} - 1} \quad (3.12)$$

$$\approx \begin{cases} \frac{\hbar\omega}{T} e^{-\frac{\hbar\omega}{T}} T \ll \hbar\omega \\ 1 + \ln \left(\frac{T}{\hbar\omega} \right) T \gg \hbar\omega \end{cases} \quad (3.13)$$

Infine E:

$$E = F + TS = \hbar\omega \left(\frac{1}{2} + \frac{1}{e^{\beta\hbar\omega} - 1} \right) \quad (3.14)$$

$$\approx \begin{cases} \frac{\hbar\omega}{2}, T \ll \hbar\omega \\ T, T \gg \hbar\omega \end{cases} \quad (3.15)$$

Osserviamo, quindi, che a basse temperature $T \ll \hbar\omega$ l'oscillatore è nello stato fondamentale, mentre gli stati termicamente eccitati sono caratterizzati dalla distribuzione statistica di Bose-Einstein $n_B(\hbar\omega) \equiv 1/[e^{\beta\hbar\omega} - 1]$; inoltre l'energia media E aumenta linearmente con T a temperature sempre più alte, a dimostrazione del fatto che aumentano anche i gradi di libertà dell'oscillatore. Per un oscillatore armonico, quindi, gli autovalori dell'energia sono perfettamente definiti e la funzione di partizione Z è perfettamente definita. Tuttavia non sempre si hanno a disposizione gli autostati dell'energia ed è pertanto necessario introdurre il concetto di *path integral* (integrale sui cammini) per poter definire Z . Rappresentiamo, dunque, Z nella base delle $|x\rangle$.

Iniziamo con lo scrivere l'operatore osservabile $\hat{P}$ nella base $|x\rangle$:

$$\langle x|\hat{p}|p\rangle = p\langle x|p\rangle = -i\hbar\partial_x\langle x|p\rangle \Rightarrow \langle x|p\rangle = Ae^{\frac{ipx}{\hbar}} \quad (3.16)$$

dove A è una costante che determineremo più avanti. Scriviamo le relazioni di completezza per le basi $|x\rangle$ e $|p\rangle$, rispettivamente:

$$\int dx |x\rangle\langle x| = \hat{1}, \quad \int \frac{dp}{B} |p\rangle\langle p| = \hat{1} \quad (3.17)$$

dove B è un'altra costante la cui scelta dipende anche da quella di A :

$$\begin{aligned}\hat{\mathbf{1}} &= \int dx \int \frac{dp}{B} \int \frac{dp'}{B} \langle p | \langle p | x \rangle \langle x | p' \rangle \langle p' | = \int dx \int \frac{dp'}{B} |p\rangle |A|^2 e^{\frac{i(p-p')x}{\hbar}} \langle p' | \\ &= \int \frac{dp}{B} \int \frac{dp'}{B} |p\rangle |A|^2 2\pi\hbar \delta(p' - p) = \frac{2\pi\hbar A}{B} \int \frac{dp}{B} |p\rangle \langle p| = \frac{2\pi\hbar |A|^2}{B} \hat{\mathbf{1}}.\end{aligned}\quad (3.18)$$

Questo implica che $B = 2\pi\hbar |A|^2$. Posto $A = 1$, $B = 2\pi\hbar$. Possiamo passare, dunque, al calcolo della funzione di partizione scegliendo la base delle $|x\rangle$:

$$Z = \text{Tr}[e^{-\beta\hat{H}}] = \int dx \langle x | e^{-\beta\hat{H}} | x \rangle = \int dx \langle x | e^{-\frac{\epsilon\hat{H}}{\hbar}} \dots e^{-\frac{\epsilon\hat{H}}{\hbar}} | x \rangle. \quad (3.19)$$

Il termine $e^{-\beta\hat{H}}$ è stato diviso in $N \gg 1$ pezzi diversi ed è stato posto $\epsilon \equiv \beta\hbar/N$.

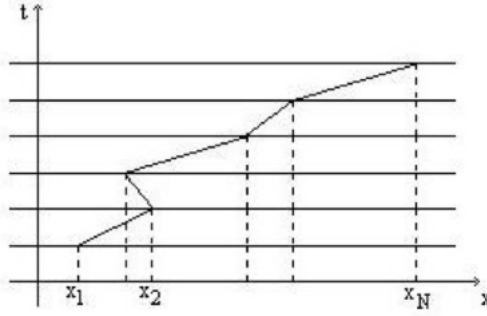


Figura 3.1: Discretizzazione dell'intervallo temporale

Arrivati a questo punto, per facilitare i conti e velocizzarli, possiamo inserire nell'equazione precedente il fattore:

$$\hat{\mathbf{1}} = \int \frac{dp_i}{2\pi\hbar} |p_i\rangle \langle p_i|, i = 1, \dots, N. \quad (3.20)$$

a sinistra di ogni esponente, ed analogamente, il fattore:

$$\hat{\mathbf{1}} = \int dx_i |x_i\rangle \langle x_i|, i = 1, \dots, N \quad (3.21)$$

alla loro destra; in questo modo non faremo altro che considerare elementi matriciali (approssimati al primo ordine in ϵ) del tipo:

$$\begin{aligned}\langle x_{i+1} | p_i \rangle \langle p | e^{-\frac{\epsilon}{\hbar} \hat{H}(\hat{p}, \hat{x})} | x_i \rangle &= e^{\frac{i p_i x_{i+1}}{\hbar}} \langle p | e^{-\frac{\epsilon}{\hbar} H(p_i, x_i) + O(\epsilon^2)} | x_i \rangle = \\ &= \exp \left\{ -\frac{\epsilon}{\hbar} \left[\frac{p_i^2}{2m} - i p_i \frac{x_{i+1} - x_i}{\epsilon} + V(x_i) + O(\epsilon) \right] \right\}\end{aligned}\quad (3.22)$$

Inoltre, matematicamente:

$$\langle x_1 | x \rangle = \delta(x_1 - x) \quad (3.23)$$

e quindi possiamo eseguire l'integrale su x . Allo stesso modo, il bra $\langle x_{i+1} |$ ha lo stesso ruolo dello stato $\langle x | = \langle x_1 |$. Passando al limite per $N \rightarrow \infty$, rimuoviamo l' $O(\epsilon)$.

La funzione di partizione sarà quindi:

$$Z = \lim_{N \rightarrow \infty} \int \left[\prod_{i=1}^N \frac{dx_i dp_i}{2\pi\hbar} \right] \exp \left\{ -\frac{1}{\hbar} \sum_{j=1}^N \epsilon \left[\frac{p_j^2}{2m} - ip_j \frac{x_{j+1} - x_j}{\epsilon} + V(x_j) \right] \right\} \Big|_{x_{N+1} \equiv x_1, \epsilon \equiv \beta\hbar/N} \quad (3.24)$$

Intendendo la misura di integrazione nel limite di $N \rightarrow \infty$ e imponendo la condizione di periodicità, e quindi di eseguire l'integrale su una traiettoria chiusa, otteniamo la forma continua:

$$Z = \int_{x(\beta\hbar)=x(0)} \frac{Dx Dp}{2\pi\hbar} \exp \left\{ -\frac{1}{\hbar} \int_0^{\beta\hbar} d\tau \left[\frac{[p(\tau)]^2}{2m} - ip(\tau)\dot{x}(\tau) + V(x(\tau)) \right] \right\} \quad (3.25)$$

Le variabili discrete x_i al continuo sono rappresentate dalla funzione $x(\tau)$ e il massimo valore delle coordinate τ si ottengono da $\epsilon N = \beta\hbar$. Ritornando ora al path integral discreto, osserviamo che l'integrale sui momenti p_i è l'integrale Gaussiano che può essere calcolato esplicitamente:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{dp_i}{2\pi\hbar} \exp \left\{ -\frac{\epsilon}{\hbar} \left[\frac{p_i^2}{2m} - ip_i \frac{x_{i+1} - x_i}{\epsilon} \right] \right\} = \sqrt{\frac{m}{2\pi\hbar\epsilon}} \exp \left[-\frac{m(x_{i+1} - x_i)^2}{2\hbar\epsilon} \right] \quad (3.26)$$

Sostituendola nell'equazione (3.25), otteniamo:

$$Z = \lim_{N \rightarrow \infty} \int \left[\prod_{i=1}^N \frac{dx_i}{\sqrt{2\pi\hbar\epsilon/m}} \right] \exp \left\{ -\frac{1}{\hbar} \sum_{j=1}^N \epsilon \left[\frac{m}{2} \left(\frac{x_{j+1} - x_j}{\epsilon} \right)^2 + V(x_j) \right] \right\} \Big|_{x_{N+1} \equiv x_1, \epsilon \equiv \beta\hbar/N} \quad (3.27)$$

che può ancora essere scritto in forma continua. Notiamo che la misura contiene un fattore divergente per $N \rightarrow \infty$:

$$C \equiv \left(\frac{m}{2\pi\hbar\epsilon} \right)^{N/2} = \exp \left[\frac{N}{2} \ln \left(\frac{mN}{2\pi\hbar^2\beta} \right) \right] \quad (3.28)$$

Tuttavia questo fattore è indipendente dalle proprietà del potenziale $V(x_j)$ e non contiene informazioni sulla dinamica del sistema; per ora possiamo riportarlo al continuo senza definirlo:

$$Z = C \int_{x(\beta\hbar)=x(0)} Dx \exp \left\{ -\frac{1}{\hbar} \int_0^{\beta\hbar} d\tau \left[\frac{m}{2} \left(\frac{dx(\tau)}{d\tau} \right)^2 + V(x(\tau)) \right] \right\} \quad (3.29)$$

Confrontiamo l'equazione 2.30 con quello che sappiamo a $T=0$: il path-integral è dato da:

$$\exp\left(\frac{i}{\hbar} \int dt L_M\right), L_M = \frac{m}{2} \left(\frac{dx}{dt}\right)^2 - V(x) \quad (3.30)$$

Quindi l'equazione (3.30) si può ricavare dalla precedente con i seguenti passaggi:

- 1) Applicare una rotazione di Wick (rotazione nel piano complesso), attraverso la sostituzione: $\tau \equiv it$, con $\tau \in \mathbb{R}$;
- 2) introdurre la lagrangiana Euclidea L_E , definita come:

$$L_E = -L_M(\tau = -it) = \frac{m}{2} \left(\frac{dx}{d\tau}\right)^2 + V(x); \quad (3.31)$$

- 3) restringere la quantità τ all'intervallo $(0, \beta\hbar)$;
- 4) richiedere la periodicità della funzione $x(\tau)$: $x(0) = x(\beta\hbar)$.

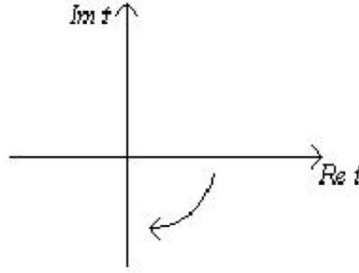


Figura 3.2: Rotazione di Wick

Con queste considerazioni, l'esponentiale della (3.31) sarà:

$$\exp\left(\frac{i}{\hbar} \int dt L_M\right) \rightarrow \exp\left(-\frac{1}{\hbar} S_E\right) \equiv \exp\left(-\frac{1}{\hbar} \int_0^{\beta\hbar} d\tau L_E\right) \quad (3.32)$$

dove abbiamo introdotto l'azione euclidea (S_E), reale e definita positiva.

Ritorniamo al caso del nostro oscillatore armonico, calcoliamone il path integral con l'equazione (3.30) e confrontiamo il risultato con la Z di partizione calcolata nella prima parte del capitolo (equazione (3.11)).

Iniziamo rappresentando un'arbitraria funzione $x(\tau)$, con $0 < \tau < \beta\hbar$, con

la proprietà che $x((\beta\hbar)^-) = x(0^+)$ come serie di Fourier:

$$x(\tau) \equiv T \sum_{n=-\infty}^{+\infty} x_n e^{i\omega_n \tau} \quad (3.33)$$

Poiché abbiamo richiesto la periodicità della funzione $x(\tau)$, avremo:

$$e^{i\omega_n \beta\hbar} = 1 \Rightarrow \omega_n \beta\hbar = 2\pi n, n \in \mathbb{Z}. \quad (3.34)$$

le frequenza $\omega_n = \frac{2\pi T n}{\hbar}$ vengono dette frequenze di Matsubara e le corrispondenti ampiezze x_n sono dette modi di Matsubara. Imponiamo ora che le quantità $x(\tau)$ siano reali:

$$x(\tau) \in \mathbb{R} \Rightarrow x^*(\tau) = x(\tau) \Rightarrow x_n^*(\tau) = x_{-n} \quad (3.35)$$

Scrivendo $x_n = a_n + ib_n$ imponiamo che:

$$x_n^* = a_n - ib_n = x_{-n} = a_{-n} + ib_{-n} \Rightarrow \begin{cases} a_n = a_{-n} \\ b_n = -b_{-n} \end{cases} \quad (3.36)$$

inoltre, $b_0 = 0$ e $x_{-n}x_n = a_n^2 + b_n^2$; possiamo quindi scrivere:

$$x(\tau) = T \left\{ a_0 + \sum_{n=1}^{\infty} [(a_n + ib_n)e^{i\omega_n \tau} + (a_n - ib_n)e^{-i\omega_n \tau}] \right\} \quad (3.37)$$

a_0 è detta *ampiezza di Matsubara di modo 0*. Con questa rappresentazione di $x(\tau)$ nella (3.34), avremo:

$$\begin{aligned} \frac{1}{\hbar} \int_0^{\beta\hbar} d\tau x(\tau)y(\tau) &= T^2 \sum_{m,n} x_n y_m \frac{1}{\hbar} \int d\tau e^{i(\omega_n + \omega_m)\tau} \\ &= T^2 \sum_{m,n} x_n y_m \frac{1}{T} \delta_{n,-m} = T \sum_n x_n y_{-n} \end{aligned} \quad (3.38)$$

In particolare, l'argomento dell'esponenziale contenuto nell'equazione (3.30)

diventa:

$$\begin{aligned}
& -\frac{1}{\hbar} \int_0^{\beta\hbar} d\tau \frac{m}{2} \left[\frac{dx(\tau)}{d\tau} \frac{dx(\tau)}{d\tau} + \omega^2 x(\tau)x(\tau) \right] \\
& = -\frac{mT}{2} \sum_{n=-\infty}^{\infty} x_n [i\omega_n i\omega_{-n} + \omega^2] x_{-n} \\
& = -\frac{mT}{2} \sum_{n=-\infty}^{\infty} (\omega_n^2 + \omega^2)(a_n^2 + b_n^2) \\
& = -\frac{mT}{2} \omega^2 a_0^2 - mT \sum_{n=1}^{\infty} (\omega_n^2 + \omega^2)(a_n^2 + b_n^2)
\end{aligned} \tag{3.39}$$

Dobbiamo adesso considerare il coefficiente di normalizzazione C e per farlo considereremo le variabili $x(\tau)$ scritte in serie di Fourier, di componenti a_n, b_n . Le variabili indipendenti sono a_0 e $\{a_n, b_n\}$, con $n \geq 1$, e la misura quindi di $x(\tau)$ è:

$$Dx(\tau) = \left| \det \left[\frac{\delta x(\tau)}{\delta x_n} \right] \right| da_0 \left[\prod_{n \geq 1} da_n db_n \right] \tag{3.40}$$

Il cambiamento di base è puramente cinematico e non dipende dal potenziale $V(x)$, quindi possiamo definire:

$$C' = C \left| \det \left[\frac{\delta x(\tau)}{\delta x_n} \right] \right| \tag{3.41}$$

in modo da considerare ora incognita C' .

Usando l'integrale gaussiano $\int_{-\infty}^{\infty} dx \exp(-cx^2) = \sqrt{\pi/c}$, con $c > 0$, come nella misura di integrazione precedente, otteniamo che l'equazione (3.30) diventa:

$$\begin{aligned}
Z & = C' \int_{-\infty}^{\infty} da_0 \int_{-\infty}^{\infty} \left[\prod_{n \geq 1} da_n db_n \right] \exp \left[-\frac{1}{2} mT \omega^2 a_0^2 - mT \sum_{n \geq 1} (\omega_n^2 + \omega^2)(a_n^2 + b_n^2) \right] \\
& = C' \sqrt{\frac{2\pi}{mT\omega^2}} \prod_{n=1}^{\infty} \frac{n}{mT(\omega_n^2 + \omega^2)}, \\
& \text{con } \omega_n = \frac{2\pi T n}{\hbar}
\end{aligned} \tag{3.42}$$

Quindi, finchè non dipende da ω , possiamo determinare C' , calcolando il limite per ω che tende a 0; inoltre l'integrale sul modo zero a_0 è divergente per $\omega \rightarrow 0$. Questa divergenza è detta *divergenza infrarossa*, poiché emerge a grande distanza spazio-temporale: il modo zero a_0 è quindi il modo più basso. Se poi nel limite di $\omega \rightarrow 0$ andiamo a definire l'integrazione sul modo

zero, osserviamo che, dall'equazione (3.38):

$$\frac{1}{\beta\hbar} \int_0^{\beta\omega} d\tau x(\tau) = Ta_0 \quad (3.43)$$

Ta_0 è il valor medio di $x(\tau)$ nell'intervallo di τ . Possiamo pensare, quindi, da queste considerazioni, di voler regolare questo sistema restringendo il valor medio di $x(\tau)$ ad un intervallo Δx finito.

In questo modo il calcolo della divergenza infrarossa, rappresentata dal coefficiente C' , potrà essere trovato tramite confronti asintotici. Usiamo dapprima "*Effective Theory Calculations*" in quanto i calcoli di correzioni accoppiate e di confronti forniscono risultati finiti; passando quindi al limite per $\omega \rightarrow 0$ nell'equazione (3.43):

$$\begin{aligned} \lim_{\omega \rightarrow 0} Z_{regolata} &= C' \int_{\Delta x/T} da_0 \int_{-\infty}^{\infty} \left[\prod_{n \geq 1} da_n db_n \right] \exp \left[-mT \sum_{n \geq 1} \omega_n^2 (a_n^2 + b_n^2) \right] \\ &= C' \frac{\Delta x}{T} \prod_{n=1}^{\infty} \frac{\pi}{mT\omega_n^2}, \\ \text{con } \omega_n &= \frac{2\pi Tn}{\hbar} \end{aligned} \quad (3.45)$$

Dopodiché possiamo applicare "*Full Theory Computation*" in quanto, senza il potenziale $V(x)$ che è stato messo a 0 nel limite di $\omega \rightarrow 0$, l'equazione (3.20) può essere calcolato:

$$\begin{aligned} \lim_{\omega \rightarrow 0} Z_{regulated} &= \int_{\Delta x} dx \langle x | e^{-\frac{\hat{p}^2}{2mT}} | x \rangle \\ &= \int_{\Delta x} dx \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dp}{2\pi\hbar} \langle x | e^{-\frac{\hat{p}^2}{2mT}} | p \rangle \langle p | x \rangle \\ &= \int_{\Delta x} dx \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dp}{2\pi\hbar} e^{-\frac{\hat{p}^2}{2mT}} \langle x | p \rangle \langle p | x \rangle \\ &= \frac{\Delta x}{2\pi\hbar} \sqrt{2\pi mT} \end{aligned} \quad (3.46)$$

Confrontando l'equazione (3.46) con l'equazione (3.45) otteniamo l'espressione formale di C' :

$$C' = \frac{T}{2\pi\hbar} \sqrt{2\pi mT} \prod_{n=1}^{\infty} \frac{mT\omega_n^2}{\pi} \quad (3.47)$$

Avendo rinunciato al regolatore (cutoff), C' ora verrà detto coefficiente di accoppiamento "ultravioletto". Avendo rimosso in questo modo la divergenza, abbiamo ottenuto un risultato finito, che ci consente di arrivare ad

un'espressione finita per la funzione di partizione Z ; dall'equazione (3.43):

$$\begin{aligned} Z &= \frac{T}{\hbar\omega} \prod_{n=1}^{\infty} \frac{\omega_n^2}{\omega_n^2 + \omega} \\ &= \frac{T}{\hbar\omega} \frac{1}{\prod_{n=1}^{\infty} \left[1 + \frac{(\hbar\omega/2\pi T)^2}{n^2} \right]} \end{aligned} \quad (3.48)$$

Con la relazione:

$$\frac{\sinh \pi x}{\pi x} = \prod_{n=1}^{\infty} \left(1 + \frac{x^2}{n^2} \right) \quad (3.49)$$

sostituendola, eventualmente, nell'equazione (3.48) ritroviamo il valore della funzione di partizione Z dell'equazione (3.11), o, alternativamente la (2.8) ritrovata già nel Capitolo 2.

Bibliografia

- [1] Claude Cohen-Tannoudji, B. Dui, Franck Laloe, *Quantum Mechanics: Volume One*.
- [2] Mikko Laine, Aleksi Vuorinen, *Basics of Thermal Field Theory*.