

Integrale sui cammini X una particella qualunque

2

1 part quantistica in basso tempo

$\Updownarrow$
N particelle distinguibili ^{classiche} ~~quantistiche~~ in basso tempo

$$Z_1 = \text{tr } e^{-\beta \hat{H}} \quad \text{di una particella}$$

$$Z_N = \frac{1}{N!} (Z_1)^N$$

$\nwarrow$ le particelle non distinguibili

$$Z_1 = \text{tr } e^{-\beta \hat{H}} = \int dx \langle x | e^{-\beta \hat{H}} | x \rangle \quad \begin{array}{l} \text{traccia autostati} \\ \text{posizione} \end{array}$$

autostati impulso $\rightarrow \langle p | \hat{T} | p' \rangle = \delta(p-p') \frac{p^2}{2m}$

autostati posizione $\rightarrow \langle x | \hat{V}(\hat{x}) | x' \rangle = \delta(x-x') V(x)$
 $\uparrow$
operatore

impulso $\rightarrow$ stati estesi

posizione $\rightarrow$ stati localizzati

$$e^{-\beta(\hat{T} + \hat{V})} \neq e^{-\beta \hat{T}} e^{-\beta \hat{V}}$$

Effetti
Quantistici
di singole particelle

facile da commutare "a forza" T e V in maniera $\textcircled{b}$
 approssimata - Nota che $\epsilon \beta$ è "piccolo"
 $\beta = E$ (piccolo rispetto ad un'energia tipica
 del sistema)

$$e^{-\epsilon(\hat{T} + \hat{V})} \approx 1 - \epsilon(\hat{T} + \hat{V}) + \mathcal{O}(\epsilon^2)$$

allora l'elemento di matrice

$$\langle x | e^{-\epsilon(\hat{T} + \hat{V})} | x' \rangle = \langle x | x' \rangle - \epsilon \langle x | \hat{T} | x' \rangle - \epsilon \underbrace{\langle x | \hat{V} | x' \rangle}_{\text{piccolo}} + \mathcal{O}(\epsilon^2)$$

mentre se calcola

$$\langle x | e^{-\epsilon \hat{T}} | x' \rangle e^{-\epsilon V(x')} = (\langle x | x' \rangle - \epsilon \langle x | \hat{T} | x' \rangle) (1 - \epsilon V(x')) + \mathcal{O}(\epsilon^2)$$

$$= \langle x | x' \rangle - \epsilon \langle x | \hat{T} | x' \rangle - \epsilon \underbrace{\langle x | x' \rangle V(x')}_{\text{piccolo}} + \epsilon^2 \langle x | \hat{T} | x' \rangle V(x') + \mathcal{O}(\epsilon^2)$$

come all'ordine ϵ^2 T e V commutano e posso
 scrivere

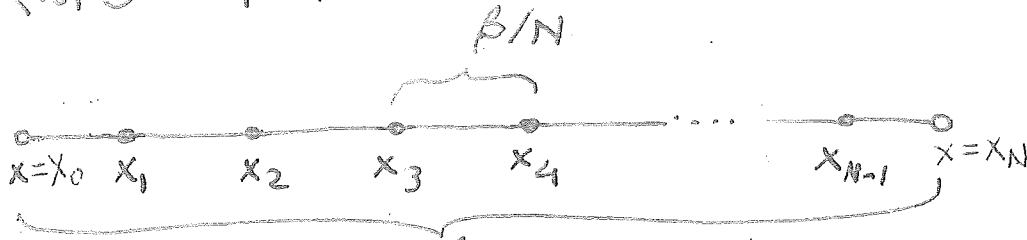
$$\langle x | e^{-\epsilon(\hat{T} + \hat{V})} | x' \rangle = \langle x | e^{-\epsilon \hat{T}} | x' \rangle e^{-\epsilon V(x')}$$

Trotter non simmetrizzato

Questo m) serve per calcolare

(c)

$$\langle x | e^{-\beta \hat{H}} | x \rangle =$$



$$= \int \prod_{i=1}^{N-1} dx_i \langle x | e^{-\frac{\beta}{N} \hat{H}} | x_1 \rangle \langle x_1 | e^{-\frac{\beta}{N} \hat{H}} | x_2 \rangle \dots \langle x_{N-1} | e^{-\frac{\beta}{N} \hat{H}} | x \rangle$$

per $N \rightarrow \infty$ posso usare la formula di Trotter

$$\langle x_k | e^{-\frac{\beta}{N} \hat{H}} | x_{k+1} \rangle = \underbrace{\langle x_k | e^{-\frac{\beta}{N} \hat{T}} | x_{k+1} \rangle e^{-\frac{\beta}{N} V(x_{k+1})}}$$

adesso mi rimane da calcolare questo

$$\begin{aligned} \langle x | e^{-\varepsilon \frac{\hat{p}^2}{2m}} | x' \rangle &= \int dp dp' \langle x | p \rangle \langle p | e^{-\varepsilon \frac{\hat{p}^2}{2m}} | p' \rangle \langle p' | x' \rangle \\ &= \int dp \langle x | p \rangle \langle p | x' \rangle e^{-\varepsilon \frac{p^2}{2m}} \stackrel{1d}{=} \int \frac{dp}{2\pi\hbar} e^{\frac{i}{\hbar} p(x-x')} e^{-\varepsilon \frac{p^2}{2m}} \end{aligned}$$

questo è un integrale gauss del tipo

$$\int \frac{dx}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} e^{-\frac{x^2}{2\sigma^2}} e^{\pm ix} = e^{-\frac{\sigma^2}{2}}$$

$$\langle x | e^{-\varepsilon \frac{\hat{p}^2}{2m}} | x' \rangle = e^{-\frac{(x-x')^2}{2\hbar^2} \frac{m}{\varepsilon}} \frac{1}{\sqrt{2\pi \frac{m}{\varepsilon}}} \quad \text{ergo ponendo } \varepsilon = \beta/N$$

$$\langle x_k | e^{-\frac{\beta}{N} \hat{H}} | x_{k+1} \rangle = \sqrt{2\pi \frac{m}{\varepsilon}} e^{-\frac{1}{2} m \varepsilon \left(\frac{x_{k+1} - x_k}{\hbar \varepsilon} \right)^2 - V(x_{k+1}) \varepsilon}$$

Sostituendo all'integrale su x l'integrale su x_0 (d)
 $(x_0 = x)$ tanto è l'integrato ottenuto

$$Z_1 = \int_{x_0}^{x_0} dx_1 \langle x_1 | e^{-\epsilon \hat{T}} | x_{N+1} \rangle e^{-\epsilon V(x_{N+1})}$$

$x_N = x_0$

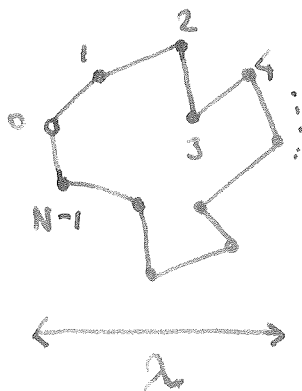
$$= \int_{x_0}^{x_0} \left(\prod_{i=1}^{N-1} \sqrt{\frac{2\pi m}{\hbar^2 \epsilon}} dx_i \right) e^{\underbrace{-\frac{1}{2} m \sum_{k=0}^{N-1} \epsilon \left(\frac{x_{k+1} - x_k}{\hbar \epsilon} \right)^2}_{(1)} - \underbrace{\sum_{k=0}^{N-1} \epsilon V(x_k)}_{(2)}}$$

dove nel pezzo (2) ho già supposto $V(x_N) = V(x_0)$
 dopo che devo avere $x_N = x_0$.

Per N grande e fissato questo è la funzione
 di partizione di un sistema di oscillatori armonici
con condizioni periodiche al contorno (1) in
un potenziale esterno (2) a

• temperatura $\epsilon = \beta/N$

• costante elastica $\kappa = m/(\hbar \epsilon)^2 = 2\pi \frac{\beta}{\epsilon^2} \frac{1}{\lambda^2} = 2\pi \left(\frac{\beta}{\epsilon} \right) \epsilon \frac{1}{\lambda^2}$



"polimero" di lunghezza $\sim \lambda$

lunghezza
 teresa
 di De Broglie

(e)

le costanti da integrare sono le scale di lunghezza -

Per $N \rightarrow \infty$ $\sum_{k=0}^{N-1} \epsilon \rightarrow \int_0^\beta d\tau$ [dimensioni
inverso di
energia]

ogni integrale in dx è scalato con

$$\sqrt{\frac{m}{2\pi\hbar^2 \epsilon}} dx = \sqrt{\frac{m}{2\pi\hbar^2 \epsilon}} \frac{\sqrt{2\pi m K T}}{\sqrt{2\pi m K T}} dx$$

ma

$$\sqrt{2\pi m K T} = \frac{h}{\lambda} \quad \text{lunghezza d'onda termica di De Broglie}$$

$$\sqrt{\frac{m}{2\pi\hbar^2 \epsilon}} dx = \sqrt{\frac{\beta}{\epsilon}} \left(\frac{dx}{\lambda} \right) \quad \text{dunque } x \text{ è scalato con } \lambda$$

----- sviluppo con classico -----

inoltre posso ridefinire le integrazioni in termini delle seguenti variabili adimensionali

$$x_0 \rightarrow x_0$$

$$x_k \rightarrow x_k = x_0 + \lambda u_k \quad k > 0 \quad \boxed{\text{adimensionalità}} \quad \boxed{u_0 = 0 = u_N}$$

$$Z_1 = \int \frac{dx_0}{\sqrt{\epsilon/\beta}} \lambda \int_{\substack{u_N=0 \\ u_0=0}}^{\substack{N-1 \\ 1}} \frac{du_k}{\sqrt{\epsilon/\beta}} e^{-S[x_0, u_k]}$$

$$S[x_0, u_k] = + \frac{1}{2} m \sum_{k=0}^{N-1} \frac{\epsilon \lambda^2}{\hbar^2} \left(\frac{u_{k+1} - u_k}{\epsilon} \right)^2 + \sum_{k=0}^{N-1} \epsilon V(x_0 + \lambda u_k) =$$

$$= + \frac{1}{2} 2\pi\beta \sum_{k=0}^{N-1} \epsilon \left(\frac{u_{k+1} - u_k}{\epsilon} \right)^2 + \beta V(x_0) + \mathcal{O}(\lambda)$$

non dipende
da x_0 !!

sviluppo x potenziale

dunque abbiamo il limite classico
 come sviluppo!

$$Z_1 = \int \frac{dx_0}{\lambda} e^{-\frac{V(x_0)}{\sqrt{\epsilon/\beta}}} \left[\frac{1}{\sqrt{\epsilon/\beta}} \int_1^{N-1} \frac{du_k}{\sqrt{\epsilon/\beta}} \right] e^{-\frac{1}{2} 2\pi\beta \sum_{k=0}^{N-1} \left(\frac{u_{k+1} - u_k}{\epsilon} \right)^2 \epsilon}$$

$x_N = 0$
 $x_0 = 0$

il termine fra parentesi è un'integrale che non dipende
da x_0 ! e fa 1 (spero...)

Con notazione continua si intende Integrale Funzionale

$$Z_1 = \lim_{\substack{N \rightarrow \infty \\ \epsilon \rightarrow 0}} \int_0^{N-1} \frac{dx_k}{\lambda} \left[\frac{1}{\sqrt{\epsilon/\beta}} \right] e^{-\frac{1}{2} m \sum_{k=0}^{N-1} \epsilon \left(\frac{x_{k+1} - x_k}{\sqrt{\epsilon}} \right)^2 - \sum_{k=0}^{N-1} V(x_{k+1}) \epsilon}$$

$x_0 = x_N$

$$= \int_{x_0}^{x_0} Dx(\tau) e^{-S[x(\tau)]}$$

$x(0) = x(\beta) = x_0$

ϵ e $\hbar$ hanno le dimensioni
 di inverso di energia!

$$S[x(\tau)] = \underbrace{+\frac{1}{2} m \int_0^\beta d\tau \frac{\dot{x}^2}{\hbar^2}}_{\text{cinetico}} + \underbrace{\int_0^\beta d\tau V(x(\tau))}_{\text{potenziale}} \quad \text{a 2' ordine}$$

per $\hbar \rightarrow 0$ il termine cinetico pesa i "cammini"
classici $\dot{x} = 0 \rightarrow x(\tau) = x(0)$ immediatamente
 si ha il limite classico

La validità delle appross. classiche è invece
legata all'esistenza di una lunghezza tipica
del potenziale

$$V(x_0 + \lambda u_k) \simeq V(x_0) + \left. \frac{dV}{dx} \right|_{x_0} \lambda u_k \quad \left| \frac{dV}{dx} \lambda \right| \ll V(x_0)$$

devo confrontare l'ordine di grandezza di x_0 con quello di λu_k
anche se $x_0 \approx 0$ come p. es. nell'oscillatore armonico
contenuto la fluttuazione di questo -

L'integrale gaussiano

$$Z = \int \left(\prod_k \frac{du_k}{\sqrt{a}} \right) e^{-a \sum_{k=0}^{L-1} (u_{k+1} - u_k)^2} = \frac{1}{\sqrt{L}} \left(\frac{\pi}{a} \right)^{\frac{L-1}{2}}$$

$$-\frac{1}{Z(a)} \frac{\partial Z}{\partial a} = \left\langle \sum_{k=0}^{L-1} (u_{k+1} - u_k)^2 \right\rangle \quad \text{se pongo poi } a = \frac{\pi \beta}{\varepsilon} = \pi L$$

ottengo il risultato delle fluttuazioni delle differenze

$$\frac{\partial Z}{\partial a} = -\frac{L-1}{2} \frac{1}{\sqrt{L}} \frac{\pi^{\frac{L-1}{2}}}{a^{(L+1)/2}}$$

$$\left\langle \sum_{k=0}^{L-1} (u_{k+1} - u_k)^2 \right\rangle = \frac{L-1}{2} \frac{a^{\frac{L-1}{2}}}{a^{\frac{L+1}{2}}} = \frac{L-1}{2} \frac{1}{a}$$

$$\frac{1}{L} \left\langle \sum_{k=0}^{L-1} (u_{k+1} - u_k)^2 \right\rangle = \frac{L-1}{2L} \frac{1}{\pi L} \sim \frac{1}{2\pi L}$$

Passaggio al tempo reale e propagatore quantistico

$$\langle x' | e^{-\frac{i}{\hbar} H t} | x \rangle = \underset{x}{\circ} \longrightarrow \underset{x'}{\circ}$$

$$\mathcal{D} = \frac{i}{\hbar} t$$

$$G(x, x'; t) = \lim_{\substack{N \rightarrow \infty \\ \epsilon \rightarrow 0}} \int \prod_{k=1}^{N-1} \left[\frac{dx_k}{\lambda} \left(\frac{it}{\epsilon} \right) \right] e^{-S(x_k)}$$

nel limite continuo

$$G(x, x'; t) = \int_{\substack{X(0)=x \\ X(t)=x'}} \mathcal{D}X(t) e^{+iS(\frac{1}{\hbar})}$$

$$S' = -\frac{1}{2} \int_0^t d\left(\frac{it'}{\hbar}\right) \left(\frac{dx}{d\frac{it'}{\hbar}} \right)^2 \frac{1}{\hbar^2} - \int_0^t d\left(\frac{it'}{\hbar}\right) V(x(t'))$$

$$= \frac{1}{2} \frac{i}{\hbar} \int_0^t dt' m \dot{x}^2 - \frac{i}{\hbar} \int_0^t dt' V(x')$$

in genere in HQ definito

$$S' = \int dt \mathcal{L}(x, \dot{x}) \text{ ed infatti}$$

$$S' = \frac{i}{\hbar} \left[\int dt' \frac{1}{2} m \dot{x}^2 - \int dt' V(x(t')) \right]$$