

Meccanica statistica di particelle quantistiche: dalla formulazione discreta di Trotter-Suzuki all'integrale di cammino

Candidato: Giacomo Sorelli

Relatore: Prof. Alessandro Cuccoli

In questo lavoro di tesi è stata presa in esame la formulazione della meccanica statistica di particelle quantistiche mediante integrali di cammino, o *path integral*. In particolare sono stati considerati due diversi approcci: il primo è quello proposto da Richard Feynman, che per primo introdusse questo formalismo; il secondo sfrutta invece la cosiddetta decomposizione di Trotter-Suzuki per la matrice densità ρ . I due metodi affrontano il problema adottando due diversi punti di partenza, in quanto nel primo caso si considera direttamente la matrice densità come path integral per poi andare a determinarne una espressione esplicita, sfruttando la conoscenza della ρ per la particella libera; la formulazione di Trotter-Suzuki si basa invece sull'introduzione di un'espressione approssimata discreta per la matrice densità, che si rivela però equivalente ad una partizione dell'intervallo di tempo immaginario $[0, \hbar\beta]$ in un numero intero P di sottointervalli, che nel limite del continuo, cioè $P \rightarrow \infty$, restituisce l'integrale di cammino. Il numero P è detto numero di Trotter.

Seguendo l'approccio di Feynman si mette bene in luce il concetto di integrale di cammino, evidenziando il rapporto fra il cammino classico e i possibili cammini quantistici nello spazio delle fasi. Con il metodo di Trotter-Suzuki si ottiene il path integral in modo costruttivo, con passaggi matematici piuttosto semplici e introducendo espressioni discrete che si prestano ad essere usate in trattazioni di tipo numerico.

Nella seconda parte della tesi si eseguono esplicitamente i calcoli della matrice densità nel caso di un oscillatore armonico unidimensionale, che è stato scelto poiché ammette soluzioni analitiche non solo per quanto riguarda la soluzione esatta, ma anche per la sua rappresentazione a P finito.

La soluzione esatta è stata calcolata sia in una visione "alla Feynman", mediante uno sviluppo intorno alla soluzione classica, sia prendendo il limite $P \rightarrow \infty$ della formulazione discreta.

Sfruttando il risultato a P finito abbiamo calcolato, nel caso dell'oscillatore armonico, due estimatori per l'energia cinetica, che abbiamo poi confrontato con il risultato esatto. Abbiamo notato che questi approssimano uno per eccesso e l'altro per difetto il risultato esatto e che si avvicinano ad esso al crescere di P come previsto, con una rapidità di convergenza dipendente dal parametro di "quanticità" $f = \frac{\hbar\omega}{2k_B T}$ dell'oscillatore. Il confronto dei risultati ottenuti a P finito con i due diversi estimatori, fra loro e con il risultato esatto, può dare utili indicazioni per le simulazioni numeriche, che rappresentano di solito l'unico metodo disponibile per lo studio di sistemi con potenziali di interazione non lineari che non consentono di ottenere una soluzione analitica.