

Capitolo 1

Campi di spostamento e onde elastiche

1.1 Introduzione

La teoria dei campi nasce per sopperire all'impossibilità tecnica della meccanica quantistica di gestire sistemi con un numero molto grande (o al limite, infinito) di gradi di libertà. Se consideriamo ad esempio sistemi costituiti da un numero di elementi interagenti dell'ordine del numero Avogadro, le eccitazioni di un singolo elemento può tradursi in eccitazioni collettive come onde elastiche e sonore, alle quali come vedremo sarà associato un campo, detto *campo di spostamento*. A basse temperature, dalla quantizzazione di questo campo, otterremo una descrizione particellare che darà luogo al concetto di *fonone*. Un discorso analogo verrà fatto per il campo elettromagnetico, la cui quantizzazione darà luogo al *fotone*.

1.2 Onde elastiche unidimensionali

Consideriamo una catena lineare, costituita da N atomi collegati da 'molle', e chiusa su se stessa con condizione di bordo periodica: l'atomo $(N + 1)$ -esimo coincide con il primo. Gli atomi hanno tutti massa m , le molle hanno tutte costante elastica c , e la distanza che separa due atomi con le molle a riposo è a

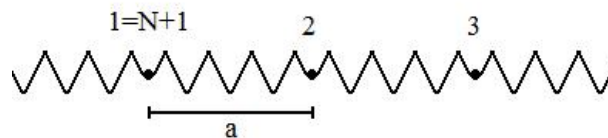


Figura 1.1: Catena unidimensionale

Le variabili del sistema saranno gli spostamenti dei singoli atomi dalla loro posizione di equilibrio x_0 , definiremo allora delle variabili $u_i = x_i(t) - x_0$. La lagrangiana del sistema è:

$$L = T - V = \frac{1}{2}m \sum_{i=1}^N \dot{u}_i^2 - \frac{1}{2}c \sum_{i=1}^N (u_i - u_{i+1})^2$$

Le equazioni del moto si ottengono dalle equazioni di Eulero-Lagrange:

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{u}_i} = \frac{\partial L}{\partial u_i}$$

che in questo caso restituiscono:

$$m\ddot{u}_i = -c(u_i - u_{i-1} + u_i - u_{i+1})$$

Il modello è molto particolare, date le ipotesi sotto le quali è costruito:

- **Armonicità del moto:** la lagrangiana è quadratica negli spostamenti, e le equazioni del moto sono lineari. Stiamo trascurando quindi tutti i termini di ordine maggiore di 3 (approssimazione di *piccoli spostamenti*)
- Stiamo trascurando eventuali **forze di richiamo**, ovvero un termine aggiuntivo della forma:

$$V_{richiamo} = -\frac{1}{2}m\omega_0^2 \sum_{i=1}^N u_i^2$$

Questo termine è tipico di particelle cariche in reticolo cristallino, poichè esse tendono a conservare la loro posizione. Il coefficiente ω_0 ha le dimensioni di una velocità angolare, ed è pari a zero nel caso di *onde longitudinali* o di onde di pressione, mentre è diverso da 0 nel caso di *onde di plasma*.

- Le forze agiscono solo tra atomi adiacenti (**interazione tra primi vicini**).

Il fatto che le equazioni di moto siano in numero elevato (N) e siano accoppiate tra loro, complica la risoluzione del sistema. Assumeremo per il generico spostamento u_j una forma del tipo:

$$u_j = \text{Re}[A(t)e^{i\chi j}] = A(t)e^{i\chi j} + c.c.$$

in questo modo si ha:

$$\begin{aligned} u_{j+1} &= A(t)e^{i\chi(j+1)} = e^{i\chi}u_j \\ u_{j-1} &= A(t)e^{i\chi(j-1)} = e^{-i\chi}u_j \end{aligned}$$

Le equazioni di moto si riscrivono:

$$m\ddot{A}(t)e^{i\chi j}u_j = -c(1 - e^{i\chi} + 1 - e^{-i\chi})A(t)e^{i\chi j}u_j \Rightarrow m\ddot{A}(t)e^{i\chi j} = -c(1 - e^{i\chi} + 1 - e^{-i\chi})A(t)e^{i\chi j} = -2c(1 - \cos(\chi))$$

dunque

$$\ddot{A}(t) = -\frac{2c}{m}(1 - \cos(\chi))A(t) \Rightarrow A(t) = A(0)e^{-i\omega_\chi t}$$

Allora possiamo riscrivere lo spostamento u_j come:

$$u_j = \text{Re}[A(t)e^{i\chi j}] = A(0)e^{i\chi j}e^{-i\omega_\chi t} + c.c.$$

dove ω_χ è definito da:

$$\omega_\chi^2 = \frac{2c}{m}(1 - \cos(\chi)) = 4\frac{c}{m}\sin^2\left(\frac{\chi}{2}\right)$$

La precedente relazione prende il nome di *relazione di dispersione* del sistema, e gli ω_k vengono detti *modi normali*. Osserviamo che la condizione di bordo periodica ha come conseguenza che $e^{i\chi N} = 1$, dunque χN deve essere un multiplo di 2π :

$$\chi N = 2\pi n \Rightarrow \chi = \frac{2\pi}{N}n$$

dunque supponendo il sistema come *circolare* abbiamo ottenuto la quantizzazione di χ . Atomi i cui χ differiscono per un multiplo di 2π coincidono, dunque alla fine avremo soltanto N soluzioni indipendenti. Possiamo quindi limitarci alla prima zona di Brillouin: nel caso N sia pari avremo $n = -\frac{N}{2}, -\frac{N-1}{2}, \dots, 0, \dots, \frac{N-1}{2}$, nel caso N sia dispari invece non abbiamo $n = 0$ e avremo $n = -\frac{N-1}{2}, -\frac{N-3}{2}, \dots, -\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \dots, \frac{N-3}{2}, \frac{N-1}{2}$, ovvero in entrambi i casi N interi diversi (N modi totali).

Per studiare l'evoluzione temporale del sistema è necessario sapere le condizioni iniziali $u_i(0)$, $\dot{u}_i(0)$, dalle quali è possibile ricavare le ampiezze iniziali dei modi propri, $A(0)$.

La trattazione eseguita finora è riferita al caso di onde elastiche longitudinali (\rightarrow *onde di pressione*), e ce ne possiamo accorgere facendo il **limite continuo**:

- $N \rightarrow \infty$
- $a \rightarrow 0$
- $Na = L$ (costante)

Nel limite continuo effettueremo i seguenti cambiamenti:

- definiamo una densità di massa $\mu = \frac{m}{a}$, e imponiamo che sia finita, dunque se $a \rightarrow 0$ anche $m \rightarrow 0$;
- sostituiamo la costante elastica c con il *parametro di compressibilità* $K = ca$, e imponiamo che $c \rightarrow \infty$ come $\frac{1}{a}$ in modo che anche K sia finito;
- riscriviamo lo spostamento del j -esimo atomo come (indichiamo con $x_j = ja$ la posizione): $u_j(t) \equiv u(x_j, t) \rightarrow u(x, t)$;
- $\lim_{a \rightarrow 0} \frac{u(x_{j+1}) - u(x_j)}{a} = \frac{\partial u}{\partial x}$,

Le equazioni del moto si trasformano in questo modo:

$$\begin{aligned} a\mu\ddot{u}(a_j) &= -\frac{K}{a}(u(x_j) - u(x_{j+1}) + u(x_j) - u(x_{j-1})) \\ \Rightarrow \mu\ddot{u}(a_j) &= \frac{K}{a}\left(\frac{\Delta u_{j+1}}{a} - \frac{\Delta u_j}{a}\right) \end{aligned}$$

Quando $a \rightarrow 0$, si ha

$$\mu\ddot{u}(x) = K \frac{\partial^2 u(x, t)}{\partial x^2}$$

che è un'equazione di d'Alembert unidimensionale, e descrive il moto di onde elastiche all'interno della catena, che si propagano con velocità $v = \sqrt{\frac{K}{\mu}}$. Il parametro χ nel limite continuo e nella prima zona di Brillouin assume

valori compresi tra $-\pi$ e π , e viene sostituito anch'esso dal parametro $k = \frac{\chi}{a}$ che assume il significato di *numero d'onda*. La relazione di dispersione si riscrive come:

$$\omega_\chi \rightarrow \omega_k = 4 \frac{K}{\mu a^2} \sin^2\left(\frac{ka}{2}\right)$$

e nel limite $a \rightarrow 0$:

$$\omega_k = 4 \frac{K}{\mu a^2} \sin^2\left(\frac{ka}{2}\right) \rightarrow 4 \frac{K}{\mu} \frac{k^2}{4a^2} a^2 = \frac{K}{\mu} k^2 \equiv v^2 k^2$$

Osserviamo dunque che nel limite continuo la relazione di dispersione è *non dispersiva*.

1.2.1 Formalismo lagrangiano ed equazioni di Eulero-Lagrange nel continuo

La lagrangiana nel limite continuo si scrive:

$$L = \frac{1}{2} \mu a \sum_j (\dot{u}(x_j, t))^2 - \frac{1}{2} \frac{K}{a} \sum_j (u(x_j + a, t) - u(x_j, t))^2 \rightarrow L = \frac{1}{2} \mu \int_0^L dx \left[\frac{\partial u(x, t)}{\partial t} \right]^2 - \frac{1}{2} K \int_0^L dx \left[\frac{\partial u(x, t)}{\partial x} \right]^2$$

Osserviamo che è possibile introdurre il concetto di *densità lagrangiana*, ovvero un oggetto della forma:

$$\mathfrak{L} = \frac{1}{2} \mu \left[\frac{\partial u(x, t)}{\partial t} \right]^2 - \frac{1}{2} K \left[\frac{\partial u(x, t)}{\partial x} \right]^2$$

tale che la lagrangiana vera e propria si ottiene integrando \mathfrak{L} sul volume del sistema:

$$L = \int_0^L dx \mathfrak{L}$$

Nel caso ci interessasse descrivere eccitazioni come onde di plasma, o fononi ottici, sarà necessario reintrodurre il termine ω_0 , e la lagrangiana dovrà essere modificata per contenere un termine di richiamo rispetto alle posizioni di equilibrio:

$$L \rightarrow L' = L - \frac{1}{2} \mu \omega_0^2 \int_0^L dx (u(x, t))^2$$

Inoltre, nel limite continuo è necessario modificare le equazioni di Eulero-Lagrange per sistemi discreti che abbiamo usato finora, poichè nella lagrangiana non compaiono più soltanto le variabili u e le loro derivate temporali, ma compaiono anche derivate spaziali. Introduciamo l'azione:

$$A = \int_{t_1}^{t_2} dt \int_0^L dx \mathfrak{L}(u, \dot{u}, \partial_x u, t)$$

Le equazioni di Eulero-Lagrange per il caso continuo sono ottenute come al solito imponendo la stazionarietà di A nella classe dei moti variati sincroni che conservano le configurazioni del sistema all'istante iniziale e finale, e ai bordi del sistema: $\delta u(x, t) = 0$ per $t = t_1, t_2$ e $x = 0, L$. Per l'azione si può dunque scrivere:

$$0 = \delta A = \int_0^L \int_{t_1}^{t_2} dx dt \left(\frac{\partial \mathfrak{L}}{\partial u} \delta u + \frac{\partial \mathfrak{L}}{\partial \dot{u}} \delta(\dot{u}) + \frac{\partial \mathfrak{L}}{\partial \partial_x u} \delta(\partial_x u) \right)$$

Possiamo scambiare l'ordine delle derivate nelle variazioni delle derivate di u :

$$\delta(\dot{u}) \equiv \partial_t(\delta u)$$

$$\delta(\partial_x u) \equiv \partial_x(\delta u)$$

dopodichè utilizziamo le seguenti uguaglianze:

$$\begin{aligned}\frac{\partial \mathfrak{L}}{\partial \dot{u}} \delta(\dot{u}) &= \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial \mathfrak{L}}{\partial \dot{u}} \delta u \right) - \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial \mathfrak{L}}{\partial \dot{u}} \right) \delta u \\ \frac{\partial \mathfrak{L}}{\partial (\partial_x u)} \delta(\partial_x u) &= \frac{d}{dx} \left(\frac{\partial \mathfrak{L}}{\partial (\partial_x u)} \delta u \right) - \frac{d}{dx} \left(\frac{\partial \mathfrak{L}}{\partial (\partial_x u)} \right) \delta u\end{aligned}$$

I termini $\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial \mathfrak{L}}{\partial \dot{u}} \delta u \right)$ e $\frac{d}{dx} \left(\frac{\partial \mathfrak{L}}{\partial (\partial_x u)} \delta u \right)$ si integrano immediatamente e non danno contributo, perchè δu si annulla agli estremi temporali e ai bordi. L'integrale si riscrive:

$$0 = \delta A = \int_0^L \int_{t_1}^{t_2} dx dt \left[\frac{\partial \mathfrak{L}}{\partial u} - \frac{d}{dx} \left(\frac{\partial \mathfrak{L}}{\partial (\partial_x u)} \right) - \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial \mathfrak{L}}{\partial \dot{u}} \right) \right] \delta u$$

per l'arbitrarietà di δu , affinchè l'integrale si annulli è necessario che sia identicamente nullo il termine in parentesi quadra:

$$\frac{\partial \mathfrak{L}}{\partial u} - \frac{d}{dx} \frac{\partial \mathfrak{L}}{\partial (\partial_x u)} - \frac{d}{dt} \frac{\partial \mathfrak{L}}{\partial \dot{u}} = 0$$

Tale condizione ci permette di scrivere le equazioni di Eulero-Lagrange nel caso continuo:

$$\frac{\partial \mathfrak{L}}{\partial u} = \frac{d}{dx} \frac{\partial \mathfrak{L}}{\partial (\partial_x u)} + \frac{d}{dt} \frac{\partial \mathfrak{L}}{\partial \dot{u}}$$

Esercizio: verificare che con le equazioni di Eulero-Lagrange nel caso continuo l'equazione del moto è l'equazione di d'Alembert

$$\mu \ddot{u} - K \partial_x^2 u = 0$$

Osservazioni:

- nel caso sia presente anche il termine di richiamo, l'equazione del moto diventa:

$$\ddot{u} = \omega_0^2 u + v^2 \partial_x^2 u$$

- In caso il sistema non sia unidimensionale, si può verificare che le equazioni di Eulero-Lagrange assumono la forma:

$$\frac{\partial \mathfrak{L}}{\partial u^j} = \sum_i \frac{d}{dx^i} \frac{\partial \mathfrak{L}}{\partial (\partial_i u^j)} + \frac{d}{dt} \frac{\partial \mathfrak{L}}{\partial \dot{u}^j}$$

1.2.2 Sviluppo in modi propri

Cerchiamo adesso una soluzione più generale del sistema considerato. Il significato dei modi normali infatti è il seguente: se il sistema sta oscillando con una frequenza $\omega = \pm \omega_k = \pm 2 \frac{v}{a} \sin(\frac{|k|a}{2})$, continuerà ad oscillare con tale frequenza per un tempo indefinito. In generale però, le oscillazioni del sistema saranno una sovrapposizione di più modi normali, dunque l'evoluzione sarà data da:

$$\vec{u}_N(t) = \sum_k (A_k e^{-i\omega_k t} + B_k e^{i\omega_k t}) \vec{u}^{(k)}$$

dove $\vec{u}^{(k)}$ è un vettore N -dimensionale le cui componenti sono date da:

$$u_j^{(k)} = C e^{ikx_j} = C e^{i \frac{2\pi n}{Na} x_j} \equiv e^{i \frac{2\pi n}{N} j}$$

Osservazioni:

- Nella scelta dei modi propri ci limitiamo a quelli nella prima zona di Brillouin ($k = \frac{2\pi}{L}n$, con $(n \leq \frac{N}{2})$, dunque $-\pi < ka < \pi$):

$$\sum_k \equiv \sum_{k=-\frac{\pi}{a}}^{\frac{\pi}{a}}$$

- Poichè lo spostamento $\vec{u}_N(t)$ deve essere reale, si deve avere

$$\vec{u}_N(t) = \vec{u}_N^*(t) \Rightarrow B_k = A_{-k}^*$$

Inoltre, poichè la prima zona di Brillouin è simmetrica, possiamo mandare A_{-k}^* in A_k^* .

- Lo sviluppo in serie è possibile poichè gli $u^{(k)}$ costituiscono un insieme ortonormale completo: scegliendo come costante di normalizzazione $C = \frac{1}{\sqrt{N}}$ si ottiene:

$$\vec{u}^{(k)} \cdot \vec{u}^{(k')} = \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N e^{i(k-k')x_j} = \sum_{j=1}^N e^{i \frac{2\pi}{N} (n-n')j} = \delta_{n,n'}$$

La completezza segue dalla relazione:

$$\sum_k (u_j^{(k)})^* u_l^{(k)} \equiv \sum_n e^{i \frac{2\pi}{N} n(l-j)} = \delta_{j,l}$$

Nel limite continuo, il vettore N -dimensionale $\vec{u}_N(t)$ diventerà un vettore $|u(t)\rangle$ nello spazio di Hilbert delle funzioni a quadrato sommabile, e l'evoluzione temporale di ogni punto x del sistema si otterrà dalla proiezione $u(x, t) = \langle x | u(t) \rangle$. Riscriveremo quindi lo spostamento generico come:

$$\begin{aligned} u(x, t) &= \sum_{k=-\frac{\pi}{a}}^{\frac{\pi}{a}} \frac{1}{\sqrt{L}} (A_k e^{i(kx-\omega_k t)} + A_{-k}^* e^{i(kx+\omega_k t)}) \Rightarrow \sum_{k=-\frac{\pi}{a}}^{\frac{\pi}{a}} \frac{1}{\sqrt{L}} (A_k e^{i(kx-\omega_k t)} + A_k^* e^{-i(kx-\omega_k t)}) = \\ &= \sum_{k=-\frac{\pi}{a}}^{\frac{\pi}{a}} \frac{1}{\sqrt{L}} (A_k e^{i(kx-\omega_k t)} + c.c.) \end{aligned}$$

E' conveniente scegliere l'ampiezza A_k come $A_k = \frac{1}{\sqrt{2\mu\omega_k}} a_k$, con $a_k \in \mathbb{C}$. In questo modo, l'espressione finale dello spostamento assume la forma:

$$u(x, t) = \sum_{k=-\frac{\pi}{a}}^{\frac{\pi}{a}} \frac{1}{\sqrt{2\mu\omega_k L}} (a_k e^{i(kx-\omega_k t)} + c.c.)$$

Abbiamo quindi espanso il campo $u(x, t)$ sulla base delle funzioni:

$$f_k(x, t) = \langle x | f_k(t) \rangle = \frac{1}{\sqrt{L}} e^{i(kx - \omega_k t)}$$

$$f_k^*(x, t) = \frac{1}{\sqrt{L}} e^{-i(kx - \omega_k t)}$$

con coefficienti $\frac{a_k}{\sqrt{2\mu\omega_k}}$ e $\frac{a_k^*}{\sqrt{2\mu\omega_k}}$. Essendo onde piane, esse costituiscono un set ortonormale e completo. Osserviamo che il campo $u(x, t)$ è legato allo spostamento $q(t)$ di un punto del sistema dalla relazione

$$q(t) = u(x, t)$$

quindi la densità di impulso coniugato a $q(t)$ sarà semplicemente:

$$p(t) = \mu \dot{u}(x, t) = \sum_{k=-\frac{\pi}{a}}^{\frac{\pi}{a}} -i \sqrt{\frac{\omega_k}{2L}} (a_k e^{i(kx - \omega_k t)} - c.c.)$$

Allora è possibile ricavare a_k e a_k^* in funzione delle variabili $q(t)$ e $p(t)$ osservando che:

$$\begin{aligned} \langle f_k(0) | u(0) \rangle &= \int_0^L dx f_k^*(x, 0) u(x, 0) = \int_0^L dx e^{-ikx} \sum_{k'=-\frac{\pi}{a}}^{\frac{\pi}{a}} \frac{1}{\sqrt{2\mu\omega_{k'} L}} (a_{k'} e^{ik'x} + c.c.) = \\ &= \sum_{k'=-\frac{\pi}{a}}^{\frac{\pi}{a}} \int_0^L dx \frac{1}{\sqrt{2\mu\omega_{k'} L}} (a_{k'} e^{i(k'-k)x} + a_{k'}^* e^{i(k'+k)x}) = \end{aligned}$$

ricordando che $\int_0^L e^{iax} dx = L \delta_{0,a}$

$$= \sum_{k'=-\frac{\pi}{a}}^{\frac{\pi}{a}} \sqrt{\frac{L}{2\mu\omega_{k'}}} (a_{k'} \delta_{k',k} + a_{k'}^* \delta_{k',-k}) = \sqrt{\frac{L}{2\mu\omega_k}} (a_k + a_{-k}^*)$$

Analogamente si trova

$$\mu \langle f_k(0) | \dot{u}(0) \rangle = -i \sqrt{\frac{L\mu\omega_k}{2}} (a_k - a_{-k}^*)$$

da cui si ricava:

$$\begin{aligned} a_k &= \frac{1}{2} \int_0^L dx e^{-ikx} \left(\sqrt{\frac{2\mu\omega_k}{L}} q(0) + i \sqrt{\frac{2}{L\mu\omega_k}} p(0) \right) \\ a_k^* &= \frac{1}{2} \int_0^L dx e^{ikx} \left(\sqrt{\frac{2\mu\omega_k}{L}} q(0) - i \sqrt{\frac{2}{L\mu\omega_k}} p(0) \right) \end{aligned}$$

Osserviamo che $a_{-k}^* \neq a_k$. Inoltre, in generale risulta:

$$\langle f_k(t) | u(t) \rangle = \frac{1}{\sqrt{2\mu\omega_k L}} (a_k + a_{-k}^* e^{2i\omega_k t})$$

Costruiremo adesso la lagrangiana, quindi l'hamiltoniana:

$$L = T - V$$

$$H = T + V$$

$$L = \int_0^L dx \mathcal{L} = \int_0^L dx [T - \mathcal{V}] = \int_0^L dx \left[\frac{1}{2} \mu \dot{u}^2(x, t) - \frac{1}{2} \mu \langle u | \mathcal{V} | u \rangle \right]$$

dove la densità di potenziale \mathcal{V} è diagonale sulla base dei modi normali, ovvero è definita in modo che:

$$\langle f'_k | \mathcal{V} | f_k \rangle = \omega_k^2 \delta_{k, k'}$$

Calcoliamo separatamente i due contributi:

$$\begin{aligned} T &= \int_0^L \mathcal{T} = \frac{1}{2} \mu \int_0^L dx \sum_{k, q} \frac{(-i)^2 \sqrt{\omega_k \omega_q}}{2\mu L} (a_k e^{i(kx - \omega_k t)} - c.c.) (a_q e^{i(qx - \omega_q t)} - c.c.) = \\ &= -\frac{1}{2} \sum_{k, q} \int_0^L dx \frac{\sqrt{\omega_k \omega_q}}{2L} (a_k a_q e^{i[(k+q)x - (\omega_k + \omega_q)t]} - a_k a_q^* e^{i[(k-q)x - (\omega_k - \omega_q)t]} - a_k^* a_q e^{-i[(k-q)x - (\omega_k - \omega_q)t]} + \\ &+ a_k^* a_q e^{i[(k+q)x - (\omega_k + \omega_q)t]}) = -\frac{1}{2} \sum_{k, q} \frac{\sqrt{\omega_k \omega_q}}{2} (a_k a_q \delta_{k, -q} e^{-i(\omega_k + \omega_q)t} - a_k a_q^* \delta_{k, q} - a_k^* a_q \delta_{k, q} + a_k^* a_q^* \delta_{k, -q} e^{i(\omega_k + \omega_q)t}) = \\ &= -\frac{1}{4} \sum_k \omega_k (a_k a_{-k} e^{-2i\omega_k t} - a_k a_k^* - a_k^* a_k + a_k^* a_{-k}^* e^{2i\omega_k t}) \\ V &= \frac{1}{2} \mu \int_0^L \langle u | \mathcal{V} | u \rangle = \frac{1}{2} \mu \int_0^L \sum_{k, q} \langle u | f_k \rangle \langle f_k | \mathcal{V} | f_q \rangle \langle f_q | u \rangle = \\ &= \frac{1}{2} \mu \int_0^L \sum_{k, q} \left[\frac{1}{\sqrt{2\mu\omega_k L}} (a_k^* + a_{-k} e^{-2i\omega_k t}) \right] [\omega_k^2 \delta_{k, q}] \left[\frac{1}{\sqrt{2\mu\omega_q L}} (a_q + a_{-q}^* e^{2i\omega_q t}) \right] = \\ &= \frac{1}{2} \mu \int_0^L \sum_k \frac{1}{2\mu\omega_k L} (a_k^* + a_{-k} e^{-2i\omega_k t}) \omega_k^2 (a_k + a_{-k}^* e^{2i\omega_k t}) = \frac{1}{2} \sum_k \frac{1}{2} (a_k^* + a_{-k} e^{-2i\omega_k t}) (a_k + a_{-k}^* e^{2i\omega_k t}) = \\ &= \frac{1}{4} \sum_k \omega_k (a_k^* a_k + a_k^* a_{-k}^* e^{2i\omega_k t} + a_k a_{-k} e^{-2i\omega_k t} + a_{-k} a_k^*) \equiv \\ &\equiv \frac{1}{4} \sum_k \omega_k (a_k^* a_k + a_k^* a_{-k}^* e^{2i\omega_k t} + a_k a_{-k} e^{-2i\omega_k t} + a_k a_k^*) \end{aligned}$$

Vediamo adesso che nell'hamiltoniana si elidono i termini con l'esponenziale, avremo allora:

$$H = T + V = \frac{1}{2} \sum_k \omega_k (a_k a_k^* + a_k^* a_k) = \sum_k \omega_k (a_{-k} a_{-k}^*)$$

Osserviamo che i coefficienti a_{-k} e a_{-k}^* sono ancora dei numeri, quindi commutano tra loro; questa proprietà verrà meno una volta che imporranno le regole di commutazione canoniche.

1.2.3 Quantizzazione del campo fononico

Imponiamo adesso regole di quantizzazione canoniche per le variabili $q(0) \equiv u(x, 0)$ e $p(0) \equiv \mu \dot{u}(x, 0)$ del tipo:

$$[q_x(0), p_{x'}(0)] = i \frac{\hbar}{L} \delta(x - x')$$

Se $q(0)$ e $p(0)$ diventano operatori su uno spazio di Hilbert, stessa sorte toccherà anche ad a_k e $a_k^* \rightarrow a_k^\dagger$, che soddisferanno alle seguenti regole di commutazione:

$$\begin{aligned} [a_k, a_{k'}^\dagger] &= \frac{1}{4} \int_0^L dx_1 \int_0^L dx_2 e^{-ikx_1 + ik'x_2} \left[-i \sqrt{\frac{2\mu\omega_k}{L}} \sqrt{\frac{2}{L\mu\omega_k'}} [q_{x_1}(0), p_{x_2}(0)] + i \sqrt{\frac{2\mu\omega_k'}{L}} \sqrt{\frac{2}{L\mu\omega_k}} [p_{x_1}(0), q_{x_2}(0)] \right] = \\ &= \frac{1}{4} \int_0^L dx_1 \frac{e^{-i(k-k')x_1}}{L} (-i) \cdot i\hbar \left(\sqrt{2\omega_k} \sqrt{\frac{2}{\omega_k'}} + \sqrt{2\omega_k'} \sqrt{\frac{2}{\omega_k}} \right) = \hbar \end{aligned}$$

Analogamente si dimostra che

$$[a_k, a_{k'}] = [a_k^\dagger, a_{k'}^\dagger] = 0$$

E' importante osservare che gli a_k sono indipendenti, poichè lo sono i modi normali corrispondenti. Inoltre, le regole di commutazione di a_k e a_k^* sono le stesse degli operatori di creazione e distruzione dell'oscillatore armonico, dunque possiamo mettere in corrispondenza i modi normali del sistema con N oscillatori armonici: infatti, come abbiamo visto l'hamiltoniana del sistema si riscrive (reintroducendo \hbar) come:

$$H = \sum_k \hbar\omega_k \left(a_k^\dagger a_k + \frac{1}{2} \right)$$

ovvero è la somma di tante hamiltoniane di oscillatori armonici, ognuno oscillante con frequenza ω_k . L'interpretazione degli operatori a_k e a_k^* , alla luce delle relazioni di commutazione:

$$[a_k, H] = -\hbar\omega_k a_k \quad [a_k^\dagger, H] = \hbar\omega_k a_k^\dagger$$

è quella di operatori di distruzione e creazione di una eccitazione elementare, di energia $\hbar\omega_k$, alla quale si dà il nome di **fonone**. Introduciamo lo stato di vuoto, ovvero lo stato in cui non sono presenti eccitazioni; esso è definito da:

$$a_k |0\rangle = 0 \quad \forall k$$

Il generico stato normalizzato si costruisce a partire dallo stato di vuoto mediante opportune applicazioni dell'operatore di creazione a_k^\dagger :

$$|n_1, \dots, n_j, \dots\rangle = \frac{(a_{k_1})^{n_1} \dots (a_{k_j})^{n_j} \dots}{\sqrt{n_1!} \dots \sqrt{n_j!} \dots} |0\rangle$$

tale scrittura significa che nel modo 1 ci sono n_1 fononi, nel modo k ce ne sono n_k , ecc.

L'energia del generico stato è data dalla somma:

$$E(n_1, n_2, \dots) = n_1 \hbar\omega_{k_1} + n_2 \hbar\omega_{k_2} + \dots$$

1.2.4 Lo spazio di Fock

Abbiamo detto che il generico autostato dell'hamiltoniana si ottiene come:

$$|n_1, \dots, n_j, \dots\rangle = \frac{(a_{k_1})^{n_1} \dots (a_{k_j})^{n_j} \dots}{\sqrt{n_1!} \dots \sqrt{n_j!} \dots} |0\rangle$$

In che spazio vive tale vettore? Osserviamo che poichè i numeri di occupazione non sono limitati superiormente, e il numero di modi normali è N , lo spazio in cui vivono gli autostati dell'hamiltoniana è ∞^N -dimensionale. Tale spazio prende il nome di **spazio di Fock**, dal nome del matematico russo Vladimir Fock, e lo stato $|n_1, \dots, n_j, \dots\rangle$ viene chiamato **stato di Fock**. Uno stato di Fock descrive un insieme di particelle non interagenti ed *in numero ben definito*; lo stato più generale sarà dunque una sovrapposizione di stati di Fock, e non avrà stavolta un numero definito di particelle.

Matematicamente¹, lo spazio di Fock è generato dal prodotto diretto di N spazi di Hilbert:

$$\mathbb{F} = \otimes_{n=1}^N \mathbb{H}_n$$

Per $N \rightarrow \infty$, le proprietà dello spazio di Fock differiscono da quelle di un normale spazio di Hilbert.

1.2.5 Stato a uno o due fononi e meccanica quantistica

Se si considera il generico caso in cui sia presente soltanto una eccitazione, con numero d'onda indefinito, abbiamo che il vettore di stato è descritto da una sovrapposizione di stati:

$$\sum_k \psi_k a_k^\dagger |0\rangle$$

dove ψ_k è il peso complesso relativo al modo k . Dal punto di vista concettuale tale scrittura è analoga alla rappresentazione degli impulsi della meccanica quantistica di particella singola, tuttavia per i fononi il limite di particella è complicato da trattare. Applicando l'operatore di evoluzione temporale, $U(t) = e^{-i\frac{(H-E_0)}{\hbar}t}$, alla funzione d'onda $|\psi\rangle$, si ottiene:

$$e^{-i\frac{(H-E_0)}{\hbar}t} |\psi\rangle = \sum_k \psi_k e^{-i\omega_k t} a_k^\dagger |0\rangle$$

Questo perchè in rappresentazione di Heisenberg l'evoluzione dell'operatore a_k^\dagger si ottiene in questo modo:

$$\begin{aligned} a_k^\dagger(t) &= (e^{-i\sum_{k'} \omega_{k'} a_{k'}^\dagger a_{k'} t}) a_k^\dagger (e^{i\sum_{k'} \omega_{k'} a_{k'}^\dagger a_{k'} t}) = e^{-i\omega_k a_k^\dagger a_k t} a_k^\dagger e^{i\omega_k a_k^\dagger a_k t} \\ \Rightarrow \dot{a}_k^\dagger(t) &= -i\omega_k e^{-i\omega_k a_k^\dagger a_k t} [(a_k^\dagger a_k) a_k^\dagger] e^{i\omega_k a_k^\dagger a_k t} + i\omega_k a_k^\dagger e^{-i\omega_k a_k^\dagger a_k t} [a_k^\dagger (a_k^\dagger a_k)] e^{i\omega_k a_k^\dagger a_k t} = \\ &= i\omega_k e^{-i\omega_k a_k^\dagger a_k t} [a_k^\dagger, a_k^\dagger a_k] e^{i\omega_k a_k^\dagger a_k t} = -i\omega_k e^{-i\omega_k a_k^\dagger a_k t} a_k^\dagger e^{i\omega_k a_k^\dagger a_k t} = -i\omega_k a_k^\dagger(t) \\ \Rightarrow a_k^\dagger(t) &= e^{-i\omega_k t} a_k^\dagger(0) \end{aligned}$$

L'evoluzione del singolo modo è dunque monocromatica in ω_k . Sia adesso $\psi_k(t) = \psi_k e^{-i\omega_k t}$, tale oggetto obbedisce a:

$$i\hbar \dot{\psi}_k(t) = \hbar \omega_k \psi_k(t) = E_k \psi_k(t)$$

¹Per ulteriori approfondimenti vedi [Infinite Dimensional Groups and Algebras in Quantum Physics (Lecture Notes in Physics)], di J. T. Ottesen, capitolo 1.

ovvero i coefficienti della sovrapposizione evolvono con una legge indotta dall'energia del modo. Vediamo allora che studiando uno spazio di Fock per un numero fissato di particelle, si recupera lo spazio di Hilbert della meccanica quantistica ordinaria.

Analogamente, consideriamo lo *stato a due fononi*:

$$|\psi_{k_1 k_2}\rangle = \sum_{k_1 k_2} \psi_{k_1 k_2} a_{k_1}^\dagger a_{k_2}^\dagger |0\rangle$$

E' possibile dimostrare che la trattazione di questo stato porta anche in questo caso alla meccanica quantistica di due particelle libere. Inoltre, poichè $a_{k_1}^\dagger$ e $a_{k_2}^\dagger$ commutano, lo stato $|\psi_{k_1 k_2}\rangle$ è necessariamente simmetrico nello scambio $1 \leftrightarrow 2$: di conseguenza i fononi sono **bosoni**.

1.2.6 Densità degli stati

Abbiamo visto che nel limite continuo, il numero d'onda $k = \frac{2\pi}{L}$ può assumere infiniti valori discreti. Nel caso anche il volume del sistema tenda all'infinito, il numero d'onda diventa anch'esso una variabile continua, e sarà necessario sostituire le sommatorie con degli integrali. Vediamo una serie di utili identità:

$$a \sum_i \rightarrow \int dx \Leftrightarrow \sum_i \rightarrow \frac{1}{a} \int dx$$

$$\frac{2\pi}{L} \sum_k \rightarrow \int dk \Leftrightarrow \sum_k \rightarrow \int \frac{dk}{2\pi} L$$

Tutto ciò si generalizza facilmente in 3 dimensioni, in cui $\vec{k} = (\frac{2\pi}{L_1} n_1, \frac{2\pi}{L_2} n_2, \frac{2\pi}{L_3} n_3)$, $n_1, n_2, n_3 \in \mathbb{N}$:

$$\sum_{\vec{k}} \rightarrow \int \frac{dk_1 dk_2 dk_3 L_1 L_2 L_3}{(2\pi)^3} = \int \frac{d^3 k V}{(2\pi)^3}$$

dove V è il volume del sistema. Il fattore $\frac{V}{(2\pi)^3}$ prende il nome di **densità degli stati**. Ricordando le relazioni di de Broglie, per le quali $\vec{p} = \hbar \vec{k}$, si può riscrivere l'integrale:

$$\int \frac{d^3 k V}{(2\pi)^3} = \int \frac{d^3 p V}{(2\pi \hbar)^3}$$

Seguendo le regole appena enunciate, possiamo riscrivere nel limite continuo l'espansione in modi propri dello spostamento $u(x, t)$:

$$u(x, t) = \sum_k \frac{1}{\sqrt{2\mu\omega_k L}} (a_k e^{i(kx - \omega_k t)} + h.c.) \rightarrow \int \frac{dk L}{2\pi \sqrt{2\mu\omega_k L}} (a_k e^{i(kx - \omega_k t)} + h.c.)$$

Osserviamo che gli operatori di discesa nel continuo si trasformano secondo la legge:

$$a_k \rightarrow a(k) = \sqrt{\frac{L}{2\pi}} a_k$$

e seguono le regole di commutazione:

$$[a(k), a(k')] = \hbar \delta(k - k') (\equiv \hbar \frac{L}{2\pi} \delta_{kk'})$$

Osservando che a_k ha dimensioni della radice di un'azione, ovvero $[a_k] = (m \cdot l^2 \cdot t^{-1})^{1/2}$, risulterà $[a(k)] = (m \cdot l \cdot t^{-1})^{1/2}$, dunque si ha:

$$u(x, t) = \int \frac{dk}{\sqrt{2\mu\omega_k}} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} (a(k)e^{i(kx - \omega_k t)} + h.c.)$$

e $u(x, t)$ ha le dimensioni di una lunghezza, come deve essere. Osserviamo che l'impulso è ben definito soltanto nel limite continuo e di volume infinito.