



Introduzione alla teoria formale dei molti corpi

Giampaolo Co'

Dipartimento di Matematica e Fisica, Ennio De Giorgi
Università del Salento
e
INFN, Sezione di Lecce

Premessa

Scopo delle teorie a multicorpi è la descrizione delle proprietà di un sistema composto da molte particelle partendo dalla loro mutua interazione.

In realtà le teorie a multicorpi affrontano un problema tecnico, non di principio. Le equazioni da risolvere sono note e definite dal sistema in oggetto. Per un sistema classico si tratta di risolvere le equazioni di Newton oppure, nel caso relativistico, quelle di Einstein-Lorentz. Nel caso quantistico non relativistico le equazioni da risolvere sono quelle di Schrödinger, nel caso relativistico bisogna considerare le equazioni di campo. Queste equazioni sono ben definite per un numero qualsiasi di particelle, anche infinito. Purtroppo la soluzione esatta di queste equazioni diventa sempre più difficile con l'aumentare il numero delle particelle che compongono il sistema.

Il nucleo atomico è un esempio di sistema a multicorpi. Ipotizziamo sia composto solamente da neutroni e protoni. L'equazione di Schrödinger che descrive un nucleo di A nucleoni può essere scritta come:

$$H|\Psi\rangle = E|\Psi\rangle, \quad (1)$$

in cui sia l'hamiltoniana H che la funzione d'onda $|\Psi\rangle$ dipendono dalle A coordinate spaziali dei nucleoni che compongono il nucleo, e dal loro stato di spin e isospin. Il valore dell'energia del sistema è dato da:

$$\frac{\langle \Psi | H | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle} = E. \quad (2)$$

Per risolvere questa equazione è necessario calcolare un numero di integrali a $3A$ dimensioni (le coordinate spaziali dei nucleoni) pari al numero delle possibili configurazioni di spin e isospin. Per un nucleo composto da A nucleoni, di cui Z protoni, questo numero è dato dalla formula:

$$N_{conf} = 2^A \frac{A!}{Z!(A-Z)!} \quad (3)$$

Il numero delle configurazioni di spin e isospin per alcuni nuclei, è mostrato nella tabella.

Per nuclei come ^{40}Ca questo numero raggiunge l'ordine di grandezza del numero di Avogadro e, supponendo di poter calcolare l'integrale a $3A$ dimensioni in un millisecondo, indipendentemente da quanto valga A , significa che il computer dovrebbe lavorare per 10^{20} secondi, (ricordo che l'età stimata dell'universo è dell'ordine di 10^{18} secondi).

Questo esempio fa capire come l'approccio diretto al problema dei multicorpi sia pragmaticamente fallimentare e come sia necessario sviluppare delle metodologie di soluzione approssimate delle equazioni che descrivono il sistema: questo è lo scopo delle teorie a multicorpi.

Le tecniche a multicorpi che descriverò prescindono dalle caratteristiche dell'interazione e dalla struttura interna dei componenti fondamentali del sistema.

Strettamente parlando, oggi, in fisica, si ritiene che le uniche entità puntiformi, ovvero prive di struttura interna, siano leptoni e quark, e particelle mediatrici delle quattro interazioni fondamentali, e, per

Nucleo	Z	N=A-Z	N_{conf}
^3H	1	2	24
^3He	2	1	24
^4He	2	2	96
^6He	2	4	960
^6Li	3	3	1280
^8He	2	6	7168
^{12}C	6	6	3784704
^{16}O	8	8	$8.4 \cdot 10^8$
^{40}Ca	20	20	$1.5 \cdot 10^{23}$
^{48}Ca	20	28	$4.7 \cdot 10^{27}$

Tabella 1: Numero di configurazioni di spin e isospin per alcuni nuclei.

finire, il bosone di Higgs. Ovviamente tutta la materia è composta da leptoni e quark, ma nessuno penserebbe di descrivere il ^{208}Pb , l'acqua o una galassia partendo dalla loro composizione in termini di quark e leptoni. Il punto di partenza della descrizione dei sistemi a molti corpi è la scelta delle entità da considerare puntiformi a cui poi applicare le tecniche a molti corpi.

In queste note presenterò l'approccio alla teoria a molti corpi ispirato alla teoria dei campi che è quello più noto ed che ha imposto la nomenclatura.

Queste note sono concepite per essere una **introduzione** alle tecniche a molti corpi. Lo scopo che mi sono prefisso è quello di esporre soprattutto le idee di base e le problematiche. Per questo motivo molti argomenti sono trattati senza entrare nei dettagli delle dimostrazioni che, ho pensato, avrebbero ulteriormente appesantito il già pesante apparato formale. I lettori interessati ad approfondire possono fare riferimento ai testi citati nella bibliografia.

Un ultimo avvertimento, in queste note mi occuperò esclusivamente di sistemi fermionici. L'estensione a sistemi bosonici non presenta difficoltà rilevanti sia dal punto di vista concettuale che dal punto di vista tecnico. Non è comunque da considerarsi immediata.

Indice

1	Modelli a campo medio	3
1.1	Proprietà generali	3
1.2	Simmetria sferica	4
1.2.1	Termini di spin-orbita	8
1.3	Simmetria traslazionale	10
2	Rappresentazione dei numeri di occupazione	13
2.1	Determinanti di Slater	13
2.2	Operatori di creazione e di distruzione	14
2.3	Operatori ad uno o a due corpi	17
2.4	Operatori di campo	18
3	Teoria perturbativa dei sistemi a molti corpi	21
3.1	Rappresentazioni	21
3.2	Operatore di evoluzione temporale	24
3.3	Teorema di Wick	26
3.4	Accensione adiabatica dell'interazione	28
4	Teorema di Goldstone	31
4.1	Diagrammi di Goldstone	31
4.2	Teorema di Goldstone	33
5	Teoria di Brueckner	41
5.1	Introduzione	41
5.2	La somma dei diagrammi a scala (ladder diagrams)	42
5.3	L'equazione di Bethe-Goldstone	46
5.4	Il confronto con l'equazione di Lipmann-Schwinger	48
5.5	Applicazione alla materia nucleare	49
5.6	Considerazioni finali	52
6	Applicazioni del principio variazionale	55
6.1	Introduzione	55
6.2	Principio variazionale	55
6.3	Hartree-Fock	57
6.3.1	Hamiltoniana Hartree-Fock	57
6.3.2	Equazioni di Hartree-Fock	59
6.3.3	Hartree-Fock nel gas di Fermi	62
6.4	Teoria del funzionale densità (DFT)	63

6.4.1	Teorema di Hoenberg-Kohn	63
6.4.2	Equazioni di Khon e Sham	66
6.5	Densità e funzioni d'onda di singola particella	67
7	Funzioni di Green	71
7.1	Funzioni di Green ad un corpo	71
7.1.1	Sistema di fermioni non interagenti	75
7.1.2	Relazione con la risolvete dell'equazione di Schrödinger.	77
7.1.3	Rappresentazione di Lehman	78
7.1.4	Interpretazione fisica	80
7.2	Funzione di Green a due corpi	81
7.2.1	Rappresentazione di Lehmann	82
7.3	Risposta lineare	83
7.4	Equazioni del moto	85
8	Descrizione perturbativa della funzione di Green	89
8.1	Diagrammi di Goldstone-Feynmann	91
8.2	Equazione di Dyson e Autoenergia	93
8.3	Hartree - Fock	97
8.4	Equazione di Bethe-Salpeter	102
8.5	La teoria Random Phase Approximation (RPA)	104
A	Operatori di creazione e distruzione nel modello a Shell	109
	Bibliografia	111

Capitolo 1

Modelli a campo medio

1.1 Proprietà generali

In questo capitolo illustrerò le caratteristiche del modello a campo medio che è il punto di partenza dal quale si evolvono tutte le teorie a molti corpi. Il modello a campo medio, o a particelle indipendenti, è l'approccio del problema a molti corpi più semplice da risolvere.

L'hamiltoniana che descrive il sistema a molti corpi può essere espressa come

$$H = \sum_{i=1}^A \left(-\frac{\hbar^2}{2m_i} \nabla_i^2 + V_0(i) \right) + \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^A V(i,j) , \quad (1.1)$$

dove A indica il numero di particelle di massa m_i . il primo termine indica l'energia cinetica, $V_0(i)$ un generico potenziale che agisce su ogni singola particella, e $V(i,j)$ l'interazione tra due particelle.

Nel caso si stia descrivendo un sistema atomico, o molecolare, le particelle che vengono descritte dall'hamiltoniana (1.1) sono elettroni. Per un atomo, il potenziale $V_0(i)$ è quello generato dal nucleo, quindi

$$V_0(i) = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{Z}{r_i} \quad (1.2)$$

dove r_i è la posizione dell'elettrone dal nucleo, e Z rappresenta il numero di protoni che compongono il nucleo, quindi il numero atomico che corrisponde con il numero di elettroni. Il potenziale di interazione tra due elettroni è

$$V(i,j) = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{r_{ij}} \quad (1.3)$$

dove $r_{ij} = |\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|$ è la distanza tra i due elettroni. Ovviamente nel caso atomico si ha nell'espressione (1.1) $Z = A$.

Nel caso di un nucleo atomico si ha

$$V_0(i) = 0 \quad (1.4)$$

e $V(i,j)$ rappresenta genericamente l'interazione nucleare forte tra due nucleoni.

Aggiungiamo e sottraiamo all'espressione (1.1) un termine di potenziale medio $U(i)$ che agisce esclusivamente su una particella

$$H = \underbrace{\sum_i^A \left(-\frac{\hbar^2}{2m_i} \nabla_i^2 + V_0(i) + U(i) \right)}_{H_0} + \underbrace{\frac{1}{2} \sum_{i,j}^A V(i,j) - \sum_i^A U(i)}_{H_1} , \quad (1.5)$$

Il termine tra parentesi tonde, H_0 è somma di operatori che agiscono su una particella alla volta. Possiamo quindi definire la somma di questi operatori come hamiltoniane di singola particella $h(i)$,

$$H_0 = \sum_i h(i) = \sum_i^A \left(-\frac{\hbar^2}{2m_i} \nabla_i^2 + V_0(i) + U(i) \right) . \quad (1.6)$$

Il modello a campo medio consiste nel trascurare nell'espressione (1.5) il termine H_1 . In questa approssimazione il problema a molti-corpi viene trasformato in una somma di problemi ad un corpo. Il modello è anche detto a particelle indipendenti poiché le particelle descritte da H_0 non interagiscono tra di loro. Il fatto che H_0 sia somma di termini indipendenti implica che i suoi autostati possono essere costruiti come prodotti degli autostati di $h(i)$

$$h(i)|\phi_i\rangle = \epsilon_i|\phi_i\rangle , \quad (1.7)$$

e quindi

$$H_0|\Phi\rangle = \left(\sum_i h(i) \right) |\Phi\rangle = \tilde{E}|\Phi\rangle , \quad (1.8)$$

dove

$$|\Phi\rangle = |\phi_1\rangle|\phi_2\rangle \cdots |\phi_A\rangle . \quad (1.9)$$

Per fermioni l'antisimmetria della funzione d'onda per lo scambio di due particelle implica che $|\Phi\rangle$ sia una combinazione lineare di prodotti antisimmetrizzati, che possono essere descritti come determinante di funzioni d'onda di singola particella, il determinante di Slater

$$|\Phi\rangle = \frac{1}{\sqrt{A!}} \det\{\phi_i\} . \quad (1.10)$$

Il potenziale medio inserito in H_0 è normalmente definito fenomenologicamente. Ad esempio nel caso atomico $U(i)$ è un potenziale che considera lo schermo degli altri elettroni rispetto all'interazione con il nucleo. Per nuclei atomici le espressioni di $U(i)$ più utilizzate sono l'oscillatore armonico e il potenziale di Woods-Saxon

$$U(r) = \frac{-U_0}{1 + \exp\left(\frac{r-R}{a}\right)} \quad (1.11)$$

dove U_0, R e a sono costanti reali e positive, i cui valori sono fissati dal confronto con dati empirici.

1.2 Simmetria sferica

Come visto precedentemente, nel modello a campo medio la soluzione del problema a multicorpi consiste nel risolvere per ogni particella l'equazione di Schrödinger di singola particella, l'equazione (1.7).

Atomi e nuclei sono sistemi che vengono ben descritti considerando la simmetria sferica del potenziale $U(\mathbf{r}) = U(r)$ dove $r = |\mathbf{r}|$. È conveniente cercare delle soluzioni del tipo

$$\phi(\mathbf{r}) = \sum_{n,l,\mu,\sigma} R_{nl}(r) Y_{l\mu}(\Omega) \chi_\sigma , \quad (1.12)$$

dove n, l, μ, σ sono i numeri quantici che identificano i vari termini della funzione d'onda: n numero quantico principale, l numero quantico del momento angolare orbitale, μ la sua proiezione sull'asse di quantizzazione e σ la proiezione dello spin. Ho indicato con $Y_{l\mu}$ l'armonica sferica e con $\Omega \equiv (\theta, \phi)$ la

parte angolare delle coordinate polari sferiche. Lo spinore di Pauli che descrive lo spin del fermione, elettrone o nucleone che sia, è indicato da

$$\chi_{1/2} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} ; \chi_{-1/2} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} . \quad (1.13)$$

Utilizziamo le ben note tecniche per risolvere l'Equazione di Schrödinger con un potenziale con simmetria sferica. Esprimendo l'operatore laplaciano in coordinate polari sferiche, si osserva che la parte differenziale relativa al modulo della distanza, r , è separata da quella che riguarda le coordinate angolari Ω . Autostati della parte angolare sono le armoniche sferiche $Y_{l,\mu}(\Omega)$, e gli autovalori sono $l(l+1)\hbar^2$. Operando in questo modo, e sostituendo alla parte operatoriale che agisce su Ω il termine con gli autovalori, si ottiene un'espressione che, dal punto di vista operatoriale, dipende solo da r ,

$$\left[\frac{p_r^2}{2m} + \frac{l(l+1)}{2mr^2} + U(r) - \epsilon_{nl} \right] [R_{nl}(r)Y_{l\mu}(\Omega)\chi_\sigma] = 0 , \quad (1.14)$$

dove l'espressione dell'operatore p_r^2 è

$$p_r^2 R_{nl}(r) = -\hbar^2 \frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{d}{dr} R_{nl}(r) \right) = -\hbar^2 \left(\frac{d^2}{dr^2} R_{nl}(r) + \frac{2}{r} \frac{d}{dr} R_{nl}(r) \right) . \quad (1.15)$$

Supponendo che il potenziale U dipenda solo da r , e non dallo spin della particella, si ottiene l'espressione

$$\frac{d^2}{dr^2} R_{nl}(r) + \frac{2}{r} \frac{d}{dr} R_{nl}(r) + \left[\frac{2m}{\hbar^2} (\epsilon_{nl} - U(r)) - \frac{l(l+1)}{r^2} \right] R_{nl}(r) = 0 . \quad (1.16)$$

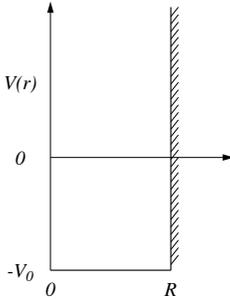


Figura 1.1: Potenziale a buca infinita.

Questa tecnica di sviluppo in armoniche sferiche della funzione d'onda, è valida per ogni potenziale che dipenda solo da r . La potenza di questa tecnica consiste nel fatto di aver ridotto il problema di risolvere un'equazione differenziale in tre dimensioni a quello della soluzione di un'equazione differenziale ad una dimensione. Solo dopo aver ottenuto l'espressione (1.16) è necessario specificare la dipendenza da r del potenziale. Qui sotto considererò alcuni potenziali molto utilizzati in letteratura.

A. Potenziale costante

Il potenziale costante è tipico di problemi a simmetria traslazionale, come il gas infinito di fermioni o la particella libera, in questo caso la costante è uguale a zero. La trattazione di questo problema è molto utile perchè gli autostati del potenziale costante possono essere utilizzati come base sulla quale sviluppare funzioni d'onda più complesse.

Consideriamo il sistema legato con dimensioni R . Il potenziale è

$$U(r) = -V_0 \text{ per } r \leq R \text{ e } U(r) = \infty \text{ per } r > R \quad (1.17)$$

come mostrato nella Figura 1.3. L'equazione (1.16) è definita solo nell'intervallo $0 \leq r \leq R$.

Definiamo

$$k^2 = \frac{2m}{\hbar^2} (\epsilon_{nl} + V_0) \quad (1.18)$$

e dividiamo la (1.16) per k^2 . Possiamo riscrivere questa equazione come dipendente dalla variabile $\rho = kr$

$$\frac{d^2}{d\rho^2} R_{nl}(\rho) + \frac{2}{\rho} \frac{d}{d\rho} R_{nl}(\rho) + \left[1 - \frac{l(l+1)}{\rho^2} \right] R_{nl}(\rho) = 0 . \quad (1.19)$$

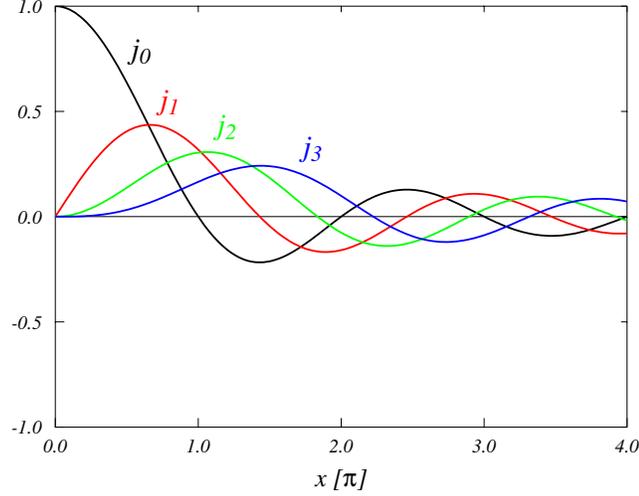


Figura 1.2: Prime quattro funzioni di Bessel sferiche

Questa equazione differenziale è ben nota in letteratura. Due categorie di soluzioni indipendenti sono le funzioni di Bessel sferiche $j_l(\rho)$, e le funzioni di Neumann $n_l(\rho)$, le prime sono regolari all'origine, e le seconde irregolari. Dato il significato fisico della funzione d'onda, solo soluzioni legate alle funzioni di Bessel sferiche sono fisicamente accettabili.

Le espressioni analitiche delle prime due funzioni di Bessel sferiche sono

$$j_0(\rho) = \frac{\sin \rho}{\rho} ; j_1(\rho) = \frac{\sin \rho}{\rho^2} - \frac{\cos \rho}{\rho} , \quad (1.20)$$

ed è valida la relazione di ricorrenza

$$(2l + 1)j_l(\rho) = \rho [j_{l+1}(\rho) + j_{l-1}(\rho)] , \quad (1.21)$$

per $l > 0$.

Dal punto di vista fisico, poiché il potenziale tende all'infinito per $r \geq R$, è necessario che j_l sia nulla nel punto $r = R$ e, ovviamente, per $r > R$. Questo impone la condizione $j_l(kR) = j_l(X_{nl}) = 0$, che, vista la definizione di k , implica

$$\frac{2m}{\hbar^2}(\epsilon_{nl} + V_0)R^2 = X_{nl}^2 ; \epsilon_{nl} = \frac{\hbar^2}{2m} \frac{X_{nl}^2}{R^2} - V_0 . \quad (1.22)$$

Gli zeri della funzione d'onda dipendono dal numero quantico principale n e da quello orbitale l . Ad esempio, per j_0 gli zeri corrispondono a multipli interi di π . È evidente dalla (1.22) che, in questo caso, tutti gli autovalori dell'energia sono discreti.

B. Oscillatore armonico a tre dimensioni

In questo caso il potenziale è

$$U(r) = \frac{1}{2}m\omega^2 r^2 . \quad (1.23)$$

Poiché $r^2 = x^2 + y^2 + z^2$ è possibile risolvere il problema riformulando l'equazione di Schrödinger in coordinate cartesiane. In questo modo l'equazione differenziale diventa separabile nelle tre coordinate e le autofunzioni possono essere costruite come prodotto delle autofunzioni dell'oscillatore armonico ad una dimensione ottenute per ognuna delle tre coordinate. L'autovalore è dato dalla somma dei singoli autovalori nelle tre direzioni.

Ovviamente, il potenziale di oscillatore armonico è di tipo centrale, quindi può essere trattato utilizzando lo sviluppo in armoniche sferiche. La funzione d'onda che si ottiene è proporzionale ai polinomi di Laguerre. Gli autovalori possono essere espressi in termini dei numeri quantici della funzione d'onda espressa in termini di armoniche sferiche. Questi autovalori possono essere riscritti come

$$\epsilon_{nl} = \hbar\omega \left(N + \frac{3}{2} \right) = \hbar\omega \left(N_x + N_y + N_z + \frac{3}{2} \right) = \hbar\omega \left(2(n-1) + l + \frac{3}{2} \right) . \quad (1.24)$$

I primi due termini esprimono gli autovalori in termini dei numeri quantici della soluzione in coordinate cartesiane, mentre l'ultima espressione si riferisce ai numeri quantici della soluzione in coordinate polari sferiche. In quest'ultimo caso $n-1$ indica il numero di nodi della funzione d'onda (il valore minimo di n è 1), ed l è il numero quantico legato al momento angolare orbitale. Il valore dell'energia dipende da N numero che può essere ottenuto modificando sia n che l . Stati che hanno la stessa energia, sebbene abbiano numeri quantici n e l differenti, sono detti degeneri. Si tratta di una degenerazione casuale, o accidentale, perché generata dalla scelta specifica di una forma funzionale del potenziale, e non dalle caratteristiche di simmetria del sistema. Una degenerazione di quest'ultimo tipo è quella legata al numero quantico μ , presente in tutti i problemi a simmetria sferica.

N	n	l	n	l	Π
0	1	0	1s		+1
1	1	1	1p		-1
2	2	0	2s	1 2	1d +1
3	2	1	2p	1 3	1f -1

Tabella 1.1: Esempio di combinazione di numeri quantici che producono lo stesso valore dell'energia (1.24). I vari livelli energetici sono identificati con la tradizionale simbologia spettroscopica. L'ultima colonna indica la parità degli stati ottenuta come $(-1)^l$.

Nella tabella (1.1) presento una lista di valori dei numeri quantici che producono lo stesso valore dell'energia (1.24). Come si vede l'oscillatore armonico produce sequenze di autostati accidentalmente degeneri. È interessante notare come tutti gli stati con la stessa energia abbiano la stessa parità, il cui valore cambia quando si incrementa l'autovalore dell'energia di $\hbar\omega$.

C. Potenziale di Coulomb

Nella descrizione di un sistema atomico a molti elettroni, il modello a campo medio interviene quando si trascura l'interazione reciproca tra gli elettroni e si considera solo l'interazione tra ogni singolo elettrone e in nucleo atomico. Eventualmente il potenziale generato dal nucleo può essere corretto dalla presenza di un potenziale medio che descrive l'effetto di schermo prodotto dalla presenza degli altri elettroni. Per distanze vicine all'origine il potenziale a cui è sensibile l'elettrone è quello prodotto dal nucleo

$$\lim_{r_i \rightarrow 0} V_0(i) + U(i) = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{Z}{r_i} , \quad (1.25)$$

mentre a distanze lontane dal nucleo l'elettrone è sensibile ad un potenziale schermato dalla presenza degli altri N elettroni

$$\lim_{r_i \rightarrow \infty} V_0(i) + U(i) = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{Z - (N-1)}{r_i} . \quad (1.26)$$

Il puro potenziale Coulombiano

$$V(r) = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{Z}{r}, \quad (1.27)$$

genera autovalori dell'energia che sono indipendenti da l , degenerazione casuale o accidentale, e da μ , degenerazione prodotta dalla simmetria sferica del potenziale

$$\epsilon_n = -\frac{1}{2}mc^2 \frac{(Z\alpha)^2}{n^2}, \quad (1.28)$$

dove α è la costante di struttura fine

$$\alpha = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{\hbar c}, \quad (1.29)$$

e n è il numero quantico principale. Fissato il valore di n il momento angolare l può assumere i valori $0, 1, \dots, n-1$.

	n	l		n	l		n	l	
ϵ_1	1	0	1s						
ϵ_2	2	0	2s	2	1	2p			
ϵ_3	3	0	3s	3	1	3p	3	2	3d

Tabella 1.2: Schema dei livelli del potenziale Coulombiano. Le energie sono identificate dal numero quantico n , quindi si ha una degenerazione accidentale per diversi valori di l .

Nella tabella 1.2 sono mostrati i livelli che hanno degenerazione accidentale. Ogni livello ha una degenerazione legata ai valori della terza componente del momento angolare caratterizzata dal numero quantico μ che può assumere $2l+1$ valori. Considerando anche il fatto che il potenziale non dipende dalla direzione dello spin dell'elettrone la degenerazione globale è $2(2l+1)$. Su questa base, considerando il principio di esclusione di Pauli, si costruisce la tavola periodica degli elementi.

1.2.1 Termine di spin-orbita

Al termine di questa sezione dedicata ai potenziali centrali, presento la trattazione del termine di spin-orbita nell'ambito delle teorie di campo medio non-relativistiche. È ormai accettato che gli effetti generati dalla presenza dell'interazione tra momento angolare orbitale e spin semi-intero del fermione abbiano origine relativistica. Questo è sempre stato evidente nell'ambito della fisica atomica, ma nell'ambito della fisica nucleare è stato accettato solo nei primi anni '90 del secolo scorso. L'effetto dell'accoppiamento spin-orbita nei nuclei è molto grande ed era difficile da comprendere utilizzando i modelli nucleari sviluppati fino a quel momento.

Per quanto ci riguarda l'idea è quella di descrivere questi effetti nell'ambito della tradizionale meccanica quantistica non relativistica. Nel modello di campo medio che stiamo discutendo, si tratta di aggiungere al termine scalare del potenziale con simmetria sferica un termine proporzionale all'accoppiamento spin-orbita,

$$V(r) = V_c(r) - \frac{2\alpha}{\hbar^2} \mathbf{l} \cdot \boldsymbol{\sigma}, \quad (1.30)$$

dove α è una costante reale. Il prodotto scalare tra \mathbf{l} e lo spin $\mathbf{s} = \boldsymbol{\sigma}/2$ è dovuto al fatto che globalmente l'hamiltoniana deve essere un operatore scalare, e questo è il più semplice tipo di accoppiamento tra momento angolare orbitale e spin.

La presenza di una dipendenza dallo spin nell'hamiltoniana ci costringe a modificare la procedura della soluzione dell'equazione di Schrödinger che era basata sullo sviluppo in onde parziali (1.12), dove

le armoniche sferiche, autostati di \mathbf{I}^2 presente nell'hamiltoniana, e gli spinori di Pauli χ , autostati di \mathbf{s}^2 , erano fattorizzati. L'assenza di termini dipendenti dallo spin nell'hamiltoniana permetteva di non considerare questi ultimi questi termini.

La situazione attuale è più complicata per la dipendenza dell'hamiltoniana dallo spin. Risulta conveniente trattare il problema considerando il momento angolare totale del fermione ottenuto come somma del momento angolare orbitale e dello spin $\mathbf{j} = \mathbf{l} + \mathbf{s}$. Questa definizione implica

$$\mathbf{j}^2 = (\mathbf{l} + \mathbf{s})^2 = \mathbf{l}^2 + \mathbf{s}^2 + 2\mathbf{l} \cdot \mathbf{s} , \quad (1.31)$$

da cui si ottiene un'espressione di $\mathbf{l} \cdot \mathbf{s}$ dipendente dai quadrati dei tre momenti angolari che stiamo considerando

$$\mathbf{l} \cdot \mathbf{s} = \frac{1}{2} (\mathbf{j}^2 - \mathbf{l}^2 - \mathbf{s}^2) . \quad (1.32)$$

A questo punto conviene considerare espressioni dell'autofunzione dell'hamiltoniana della forma

$$\phi_{nljm}(\mathbf{r}) = R_{nj}(r) \sum_{\mu\sigma} \langle l\mu \frac{1}{2}\sigma | j m \rangle Y_{l\mu}(\Omega) \chi_{\sigma} = R_{nj}(r) \mathcal{Y}_{ljm}(\Omega) , \quad (1.33)$$

dove abbiamo unito armoniche sferiche e spinori di Pauli considerando i coefficienti di Clebsch-Gordan, e abbiamo definito l'armonica sferica di spin che è autostato dei seguenti operatori

$$\mathbf{j}^2 \mathcal{Y}_{ljm}(\Omega) = j(j+1) \hbar^2 \mathcal{Y}_{ljm}(\Omega) \quad ; \quad \mathbf{j}_z \mathcal{Y}_{ljm}(\Omega) = m \hbar \mathcal{Y}_{ljm}(\Omega) , \quad (1.34)$$

$$\mathbf{l}^2 \mathcal{Y}_{ljm}(\Omega) = l(l+1) \hbar^2 \mathcal{Y}_{ljm}(\Omega) \quad ; \quad \mathbf{s}^2 \mathcal{Y}_{ljm}(\Omega) = \frac{3}{4} \hbar^2 \mathcal{Y}_{ljm}(\Omega) , \quad (1.35)$$

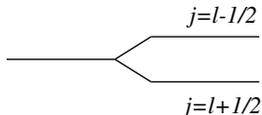
e quindi, per quanto riguarda il termine inserito nell'hamiltoniana abbiamo che

$$\mathbf{l} \cdot \mathbf{s} \mathcal{Y}_{ljm}(\Omega) = \frac{1}{2} [\mathbf{j}^2 - \mathbf{l}^2 - \mathbf{s}^2] \hbar^2 \mathcal{Y}_{ljm}(\Omega) = \frac{1}{2} \left[j(j+1) - l(l+1) - \frac{3}{4} \right] \hbar^2 \mathcal{Y}_{ljm}(\Omega) . \quad (1.36)$$

Dato che $j = l \pm 1/2$, il termine di spin-orbita produce

$$\begin{aligned} \text{per } j = l + \frac{1}{2} \quad & \left[\left(l + \frac{1}{2} \right) \left(l + \frac{3}{2} \right) - l^2 - l - \frac{3}{4} \right] = l \\ \text{per } j = l - \frac{1}{2} \quad & \left[\left(l - \frac{1}{2} \right) \left(l + \frac{1}{2} \right) - l^2 - l - \frac{3}{4} \right] = -(l+1) , \end{aligned} \quad (1.37)$$

quindi ϵ_{nl}^c , l'energia ottenuta con il solo termine V_c nella (1.30), viene modificata come segue



$$\begin{aligned} \epsilon_{nlj} &= \epsilon_{nl}^c + \alpha(l+1) \text{ per } j = l - \frac{1}{2} \\ \epsilon_{nlj} &= \epsilon_{nl}^c - \alpha l \text{ per } j = l + \frac{1}{2} \end{aligned} \quad (1.38)$$

Figura 1.3: Separazione del livello di singola particella per l'azione del termine di spin-orbita.

La definizione delle costanti della (1.30) è stata fatta in modo che per $\alpha > 0$ l'energia con $l - 1/2$ sia inferiore a ϵ_{nl}^c , e viceversa per $l + 1/2$. Questo è quanto avviene in fisica nucleare. L'effetto del termine di spin-orbita in fisica atomica è invertito.

1.3 Simmetria traslazionale

Barioni, nuclei, atomi e molecole sono sistemi ben descritti usando una simmetria rotazionale. In questi sistemi, anche se deformati, è possibile delineare la posizione di un punto attorno al quale il sistema si sviluppa e che può essere considerato il centro dal quale emerge il potenziale medio. Negli agglomerati di materia condensata domina la simmetria traslazionale, nella quale la struttura base del sistema si riproduce periodicamente in ogni direzione e non è possibile identificare un punto centrale.

Il modello di campo medio che sta alla base di questo tipo di sistemi è quello in cui il potenziale V è costante. Questo sistema fermionico viene comunemente chiamato *gas di Fermi*. Si tratta di un sistema omogeneo, di volume infinito e con un numero infinito di fermioni non interagenti. Dato che la scelta della scala dell'origine dell'energia è arbitraria, è sempre possibile definire $V = 0$. In questo caso l'equazione di Schrödinger di singola particella è

$$-\frac{\hbar^2}{2m_i} \nabla_i^2 \phi_i(\mathbf{r}) = \epsilon_i \phi_i(\mathbf{r}) , \quad (1.39)$$

con

$$\phi_i(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{\mathcal{V}}} e^{i(\mathbf{k}_i \cdot \mathbf{r})} \chi_\sigma \chi_\tau , \quad (1.40)$$

dove \mathcal{V} è il volume, e χ sono spinori di Pauli relativi allo spin e all'isospin della particella, le cui terze componenti sono indicate come σ e τ , rispettivamente. Le variabili fisiche interessanti sono quelle indipendenti da \mathcal{V} che alla fine del calcolo può essere considerato infinito.

La simmetria del problema induce a considerare il sistema racchiuso in una scatola cubica di lato $L = \mathcal{V}^{1/3}$ con condizioni al contorno periodiche

$$\phi_i(x+L, y, z) = \phi_i(x, y+L, z) = \phi_i(x, y, z+L) = \phi_i(x, y, z) . \quad (1.41)$$

Dato che

$$\phi_i(\mathbf{r} = 0) = \frac{1}{\sqrt{\mathcal{V}}} \chi_\sigma \chi_\tau , \quad (1.42)$$

per rispettare le condizioni periodiche dobbiamo imporre

$$e^{ik_x L} = e^{ik_y L} = e^{ik_z L} = 1 , \quad (1.43)$$

che implica

$$k_x = \frac{2\pi}{L} n_x ; k_y = \frac{2\pi}{L} n_y ; k_z = \frac{2\pi}{L} n_z , \quad (1.44)$$

dove n_x, n_y, n_z sono numeri interi. Si ha quindi che

$$n^3 = \frac{L^3}{(2\pi)^3} k^3 = \frac{L^3}{(2\pi\hbar)^3} p^3 \quad (1.45)$$

Il calcolo della densità degli stati inizia considerando l'espressione dell'energia in un intervallo infinitesimo, ovvero compresa tra ϵ e $\epsilon + d\epsilon$. Dato che l'impulso è legato al numero d'onda dalla relazione $\mathbf{p} = m\mathbf{v} = \hbar\mathbf{k}$, e consideriamo energie cinetiche non relativistiche, abbiamo $\epsilon = m\mathbf{v}^2/2 = \mathbf{p}^2/2m = \hbar^2\mathbf{k}^2/2m$. Il differenziale in energia è

$$d\epsilon = d\left(\frac{1}{2}m\mathbf{v}^2\right) = \frac{1}{2}m 2v dv = v m dv = v dp , \quad (1.46)$$

dove $v = |\mathbf{v}|$ e $p = |\mathbf{p}|$. La densità degli stati è data da

$$\rho(\epsilon) = \frac{d^3n}{d\epsilon} = \frac{L^3}{(2\pi\hbar)^3} d^3p \frac{1}{v dp} = \frac{\mathcal{V}}{(2\pi\hbar)^3} p^2 d\Omega_p dp \frac{1}{v dp} = \frac{\mathcal{V}}{(2\pi\hbar)^3} \frac{p^2}{v} d\Omega_p . \quad (1.47)$$

dove Ω_p sono le coordinate angolari polari sferiche che identificano la direzione di \mathbf{p} . Questa è l'espressione della densità degli stati comunemente adottata nel calcolo di probabilità di transizione e sezioni d'urto.

Calcolo adesso densità ed energia cinetica per particella nel gas di Fermi. La normalizzazione ad uno delle funzioni d'onda di singola particella implica che ogni prodotto scalare sia moltiplicato per il fattore $\mathcal{V}/(2\pi)^3$. Infatti

$$\langle \phi_a | \phi_b \rangle = \frac{\mathcal{V}}{(2\pi)^3} \int d^3 r \frac{1}{\sqrt{\mathcal{V}}} e^{-i(\mathbf{k}_a \cdot \mathbf{r})} \frac{1}{\sqrt{\mathcal{V}}} e^{i(\mathbf{k}_b \cdot \mathbf{r})} = \frac{\mathcal{V}}{(2\pi)^3} \frac{(2\pi)^3 \delta(\mathbf{k}_a - \mathbf{k}_b)}{\mathcal{V}} . \quad (1.48)$$

Calcoliamo la densità definita come

$$\rho(r) = \sum_a^A |\phi_a(\mathbf{r})|^2 , \quad (1.49)$$

dove A è il numero di fermioni che compongono il sistema. Consideriamo il sistema a temperatura zero. In questo caso i fermioni occupano completamente tutti gli stati di singola particella fino ad esaurirsi. Sono completamente occupati tutti gli stati con un'energia inferiore ad una energia massima ϵ_F detta energia di Fermi, mentre gli stati con energia maggiore sono totalmente vuoti. Nel nostro caso ogni stato è caratterizzato dal numero d'onda, direttamente legato all'energia, quindi le stesse affermazioni possono essere fatte definendo un impulso massimo detto di Fermi \mathbf{p}_F , e il relativo numero d'onda \mathbf{k}_F . La relazione tra energia e numero d'onda di Fermi è

$$\epsilon_F = \frac{\hbar^2}{2m} \mathbf{k}_F^2 . \quad (1.50)$$

Il calcolo della densità è quindi

$$\rho(r) = \sum_{k \leq k_F} |\phi_a(\mathbf{r})|^2 = \frac{\mathcal{V}}{(2\pi)^3} \mathcal{D} \int_0^{k_F} d^3 k \frac{1}{\sqrt{\mathcal{V}}} e^{-i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r})} \frac{1}{\sqrt{\mathcal{V}}} e^{i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r})} = \frac{\mathcal{D}}{(2\pi)^3} \int_0^{k_F} d^3 k . \quad (1.51)$$

In questa equazione \mathcal{D} indica il fattore di degenerazione dovuto alle caratteristiche dei fermioni che formano il sistema. Nel caso di gas di elettroni i fermioni si differenziano solo per le diverse orientazioni dello spin, mentre nel caso di materia nucleare c'è anche una differenziazione legata alla terza componente dell'isospin che distingue i protoni dai neutroni. Abbiamo quindi, per elettroni

$$\mathcal{D} = \sum_{\sigma=\pm 1/2} \chi_\sigma^\dagger \chi_\sigma = 2 , \quad (1.52)$$

e per nucleoni

$$\mathcal{D} = \sum_{\sigma=\pm 1/2} \chi_\sigma^\dagger \chi_\sigma \sum_{\tau=\pm 1/2} \chi_\tau^\dagger \chi_\tau = 4 , \quad (1.53)$$

Quindi calcolando l'integrale della (1.51) otteniamo

$$\rho(r) = \frac{\mathcal{D}}{(2\pi)^3} \int_0^{k_F} d^3 k = \frac{\mathcal{D}}{(2\pi)^3} \int_0^{k_F} k^2 dk d\Omega_k = \frac{\mathcal{D}}{(2\pi)^3} \frac{4}{3} \pi k_F^3 = \frac{\mathcal{D}}{2\pi^2} \frac{k_F^3}{3} . \quad (1.54)$$

La densità è indipendente da \mathbf{r} , come ci si aspettava, poiché abbiamo considerato il sistema omogeneo. In altre parole, avendo scelto le funzioni d'onda (1.39) come base, era implicita l'omogeneità del sistema. Più interessante è la dipendenza della densità, in numero di particelle, dalla terza potenza dell'impulso di Fermi.

È possibile calcolare l'energia cinetica media di una particella.

$$\langle \phi_a | \frac{-\hbar^2}{2m} \nabla^2 | \phi_a \rangle = \frac{\mathcal{V}}{(2\pi)^3} \int d^3 r \frac{1}{\sqrt{\mathcal{V}}} e^{-i(\mathbf{k}_a \cdot \mathbf{r})} \left(\frac{-\hbar^2}{2m} \nabla^2 \right) \frac{1}{\sqrt{\mathcal{V}}} e^{i(\mathbf{k}_a \cdot \mathbf{r})} = \frac{\hbar^2 k_a^2}{2m} \quad (1.55)$$

L'energia cinetica del sistema è quindi

$$\begin{aligned} T &= \sum_{k \leq k_F} \langle \phi_a | \frac{-\hbar^2}{2m} \nabla^2 | \phi_a \rangle = \mathcal{D} \frac{\mathcal{V}}{(2\pi)^3} \int_0^{k_F} d^3 k \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \mathcal{D} \frac{\mathcal{V}}{(2\pi)^3} \frac{\hbar^2 4\pi}{2m} \int_0^{k_F} k^2 k^2 dk \\ &= \mathcal{D} \frac{\mathcal{V}}{(2\pi)^3} \frac{\hbar^2 4\pi}{2m} \frac{k_F^5}{5} = \mathcal{D} \frac{\mathcal{V}}{(2\pi)^3} \frac{\hbar^2 4\pi}{2m} \frac{k_F^2}{5} \left(\frac{2\pi^2 3\rho}{\mathcal{D}} \right) = \frac{3}{5} \mathcal{V} \rho \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m} = \frac{3}{5} A \epsilon_F \end{aligned} \quad (1.56)$$

Quindi l'energia cinetica per particella è

$$\frac{T}{A} = \frac{3}{5} \epsilon_F \quad (1.57)$$

	ρ [10^{22} cm $^{-3}$]	k_F [10^8 cm $^{-1}$]	ϵ_F [eV]	B [dyne / cm 2]	B_{exp} [dyne / cm 2]
Li	4.70	1.11	4.75	23.84	11.5
Na	2.65	9.22	3.24	9.17	6.42
K	1.40	0.75	2.12	3.17	2.81
Rb	1.15	0.70	1.86	2.28	1.92
Cs	0.91	0.65	1.59	1.54	1.43
Cu	8.45	1.36	7.02	63.37	134.3
Ag	5.85	1.20	5.50	34.34	99.9
Al	18.06	1.75	11.65	224.74	76.0

Tabella 1.3: Le densità elettroniche sono dati empirici dai quali si ricavano i valori di k_F , Eq. (1.54), ϵ_F , Eq. (1.50), e B , Eq. (1.60). I dati empirici sono stati estratti da C. Kittel, Introduction to Solid State Physics, John Wiley, New York (1986), and N. W. Ashcroft and N. D. Mermin, Solid State Physics, Saunders, Orlando, (1976).

Possiamo calcolare la pressione del sistema utilizzando l'espressione

$$E = T = \frac{3}{5} A \epsilon_F = \frac{3}{5} A \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m} = \frac{3}{5} A \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m} \left(\frac{2\pi^2 3 A}{\mathcal{D} \mathcal{V}} \right)^{2/3} = \mathcal{S} \mathcal{V}^{-2/3} \quad (1.58)$$

La pressione è quindi

$$P = - \left(\frac{\partial E}{\partial \mathcal{V}} \right)_A = -\mathcal{S} \left(-\frac{2}{3} \right) \mathcal{V}^{-2/3} \mathcal{V}^{-1} = \frac{2}{3} \frac{E}{\mathcal{V}} = \frac{2}{3} \frac{1}{\mathcal{V}} \frac{3}{5} A \epsilon_F = \frac{2}{5} \epsilon_F \rho \quad (1.59)$$

La compressibilità K è l'inverso del modulo di compressione B

$$B = \frac{1}{K} = -\mathcal{V} \frac{\partial P}{\partial \mathcal{V}} = -\mathcal{V} \frac{2}{3} \mathcal{S} \mathcal{V}^{-5/3} \left(-\frac{5}{3} \right) \mathcal{V}^{-1} = \frac{10}{9} \frac{E}{\mathcal{V}} = \frac{2}{3} \epsilon_F \rho \quad (1.60)$$

Nella tabella 1.3 mostro i valori di k_F , ϵ_F e B calcolati per gas di elettroni di diversi cristalli. Questi valori son ottenuti usando, rispettivamente, le equazioni (1.54) (1.50) e (1.60) ed utilizzando i valori empirici della densità di elettroni. Il confronto con i valori empirici del modulo di compressione mostra chiaramente i limiti del modello a campo medio.

Capitolo 2

Rappresentazione dei numeri di occupazione

2.1 Determinanti di Slater

La Rappresentazione dei Numeri di Occupazione (RNO) basata sugli operatori di creazione e di distruzione è stata introdotta nella teoria dei campi. In questa teoria il formalismo della RNO è necessario dato che il numero di particelle non è fisso, poiché è energeticamente possibile creare coppie particella-antiparticella. In Meccanica Quantistica non relativistica, la creazione di coppie non è possibile. Il formalismo della RNO, anche se non necessario, risulta essere comunque comodo anche in ambito non relativistico per lo studio di sistemi composti da molte particelle.

Come è stato accennato nell'introduzione, considererò solo il caso fermionico.

Un sistema di N particelle è descritto dalla funzione d'onda che soddisfa l'equazione di Schrödinger indipendente dal tempo:

$$H\Psi(x_1, x_2 \dots x_N) = E\Psi(x_1, x_2 \dots x_N) \quad (2.1)$$

dove x indica tutti i numeri quantici che caratterizzano la particella: posizione (\mathbf{r}), spin (σ), isospin (τ) ed eventualmente, sapore e colore.

Dato che stiamo trattando un sistema fermionico Ψ deve essere antisimmetrica per lo scambio di due particelle:

$$\Psi(\dots x_i, \dots, x_j \dots) = -\Psi(\dots x_j, \dots, x_i \dots) \quad (2.2)$$

Ognuna di queste autofunzioni può essere scritta come combinazione lineare di un sistema completo di autofunzioni ortonormali. Lo stesso concetto può essere formulato dicendo che ogni autofunzione può essere sviluppata su una base ortonormale:

$$\Psi = \sum_i C_i \Phi_i, \quad (2.3)$$

dove ho indicato con Φ_i dei determinanti di Slater e con C_i delle costanti. Il determinante di Slater è costruito con prodotti di funzioni d'onda di particella singola che formano una base di funzioni ortonormali. Questa base viene costruita partendo da un'equazione di Schrödinger di singola particella:

$$h_\nu \phi_\nu(x) = \epsilon_\nu \phi_\nu(x), \quad (2.4)$$

dove ν è l'insieme dei numeri quantici caratterizzanti lo stato di ogni singola particella; ad esempio le tre componenti dell'impulso \mathbf{p} nel caso di onde piane, o i numeri quantici principale, n , orbitale l , momento

angolare j e la sua proiezione sull'asse di quantizzazione m , nel caso di stati generati da un potenziale a simmetria sferica.

Date le funzioni d'onda di singola particella ϕ_ν il determinante di Slater per N particelle viene costruito come:

$$\Phi(x, \dots x_N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_P (-)^P P \phi_{\nu_1}(x_1) \phi_{\nu_2}(x_2) \dots \phi_{\nu_N}(x_N), \quad (2.5)$$

in cui ho indicato con P le permutazioni tra gli indici delle coordinate. Il fattore $\sqrt{N!}$ garantisce la normalizzazione:

$$\langle \Phi | \Phi \rangle = 1 \quad (2.6)$$

L'eq. (2.5) può essere scritta come

$$\Phi(x_1 \dots x_N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} \phi_{\nu_1}(x_1) & \dots & \phi_{\nu_N}(x_1) \\ \vdots & & \vdots \\ \phi_{\nu_1}(x_N) & \dots & \phi_{\nu_N}(x_N) \end{vmatrix} \quad (2.7)$$

Il determinante di Slater è autostato di un'hamiltoniana a molti corpi che è somma delle hamiltoniane di singola particella:

$$\sum_\nu h_\nu \Phi = H_0 \Phi = \tilde{E}_0 \Phi \quad (2.8)$$

2.2 Operatori di creazione e di distruzione

Il determinante di Slater contiene informazioni ridondanti. Ciò che interessa, dal punto di vista fisico, è sapere se lo stato di singola particella ϕ_ν sia occupato oppure no. L'informazione su quali siano i fermioni che occupano quello stato è irrilevante dato che tutti i fermioni che compongono il sistema sono identici. L'informazione contenuta nel determinante di Slater può essere condensata in un insieme di numeri ordinati che indicano quali stati di singola particella sono occupati. Si può quindi costruire una corrispondenza tra determinante di Slater e questo insieme di numeri ordinati:

$$|\Phi\rangle \longrightarrow |\nu_N, \nu_2 \dots \nu_1\rangle. \quad (2.9)$$

L'ordine normalmente utilizzato è quello dell'energia crescente dello stato di singola particella. A ν_N corrisponde lo stato ad energia più alta ecc.

Questo modo di rappresentare un determinante di Slater stato è chiamato Rappresentazione dei Numeri di Occupazione RNO.

È utile legare tra loro stati con diverso numero di particelle. Ad esempio, lo stato di singola particella

$$|\phi_\nu\rangle \equiv |\nu\rangle, \quad (2.10)$$

può essere pensato come ottenuto dallo stato vuoto $|0\rangle$ aggiungendo una particella. Simbolicamente:

$$|\nu\rangle = a_\nu^+ |0\rangle, \quad (2.11)$$

dove a_ν^+ rappresenta l'operatore che crea una particella nello stato caratterizzato dai numeri quantici ν .

In generale si ha che:

$$a_\nu^+ |\nu_N \dots \nu_1\rangle = |\nu \nu_N \dots \nu_1\rangle. \quad (2.12)$$

Lo stato di $N + 1$ particelle non è necessariamente ordinato. Per sistemare nella posizione corretta la particella ν è necessario considerare che ogni cambio di posizione produce una fase negativa che moltiplica lo stato (questo sempre perché consideriamo fermioni). Le possibili ambiguità del segno si possono fissare

scegliendo la convenzione che il segno del determinante rimanga lo stesso se si crea una particella nella prima posizione, come è stato ipotizzato nello scrivere l'eq. (2.12).

Ad esempio:

$$a_{\nu_1}^+ |\nu_3 \nu_2\rangle = |\nu_1 \nu_3 \nu_2\rangle = -|\nu_3 \nu_1 \nu_2\rangle = |\nu_3 \nu_2 \nu_1\rangle \quad (2.13)$$

Dalle equazioni (2.11) e (2.12) segue che:

$$|\nu_N \dots \nu_1\rangle = a_{\nu_N}^+ a_{\nu_2}^+ \dots a_{\nu_1}^+ |0\rangle \quad (2.14)$$

Per le proprietà del determinante di Slater si ha che:

$$a_{\nu'}^+ |\nu_N \dots \nu \dots \nu_1\rangle = 0. \quad (2.15)$$

Questa operazione inserisce in un determinante una riga, o colonna, uguale a una riga, o colonna, già presente. Dal punto di vista fisico l'eq. (2.15) esprime il principio di esclusione di Pauli.

Da quanto detto si può dedurre che gli operatori di creazione godono della seguente proprietà di anticommutazione:

$$a_{\nu_1}^+ a_{\nu_2}^+ = -a_{\nu_2}^+ a_{\nu_1}^+ \quad (2.16)$$

Per dimostrare l'eq. (2.16) supponiamo $\nu > \nu'$

$$\begin{aligned} a_{\nu'}^+ a_{\nu}^+ \Phi^N(N \dots \dots 1) &= \theta_{\nu'}^A a_{\nu}^+ \Phi^{N+1}(N \dots \nu' \dots 1) = \theta_{\nu'}^A \theta_{\nu}^A \Phi^{N+2}(N \dots \nu \dots \nu' \dots 1) \\ a_{\nu}^+ a_{\nu'}^+ \Phi^N(N \dots \dots 1) &= \theta_{\nu}^B a_{\nu'}^+ \Phi^{N+1}(N \dots \nu \dots 1) = \theta_{\nu}^B \theta_{\nu'}^B \Phi^{N+2}(N \dots \nu \dots \nu' \dots 1) \end{aligned} \quad (2.17)$$

In queste equazioni ho indicato con $\theta_{\nu}^A = (-)^p \equiv (-1)^p$ la fase acquisita facendo le permutazioni necessarie per sistemare la particella ν , e analogamente $\theta_{\nu'}^A = (-)^{p'}$, mentre con θ_{ν}^B e $\theta_{\nu'}^B$ ho indicato le fasi ottenute nel secondo caso. Dato che ho ipotizzato che ν' sia minore di ν , ho che $\theta_{\nu}^A = \theta_{\nu}^B$ perché il numero di permutazioni necessario per sistemare ν è lo stesso nei due casi. D'altra parte $\theta_{\nu'}^A = -\theta_{\nu'}^B$ perché nel secondo caso c'è una permutazione in più da effettuare per sistemare ν' . Quindi:

$$a_{\nu'}^+ a_{\nu}^+ \Phi = -a_{\nu}^+ a_{\nu'}^+ \Phi \quad (2.18)$$

da cui l'equazione operatoriale (2.16). Ovviamente l'equazione (2.16) implica che:

$$(a_{\nu}^+)^2 = 0 \quad (2.19)$$

che è un altro modo di esprimere l'eq. (2.15).

Si può definire l'aggiunto dell'operatore a^+ la cui azione può essere compresa facendo l'aggiunto dell'eq. (2.11).

$$(a_{\nu}^+)^+ = a_{\nu} \quad (2.20)$$

$$|\nu\rangle = a_{\nu}^+ |0\rangle \quad \langle \nu| = \langle 0| a_{\nu} \quad (2.21)$$

$$\langle \nu_1 \nu_2 \dots \nu_N | = \langle 0| a_{\nu_1} \dots a_{\nu_{N-1}} a_{\nu_N} \quad (2.22)$$

dato che $\langle \nu | \nu \rangle = 1$ si ha che:

$$\langle 0 | \underbrace{a_{\nu} a_{\nu}^+}_{|0\rangle} |0\rangle = 1 \quad (2.23)$$

quindi,

$$\begin{aligned} |0\rangle &= a_\nu a_\nu^\dagger |0\rangle \\ &= a_\nu |\nu\rangle = |0\rangle \end{aligned} \quad (2.24)$$

L'azione di a_ν sullo stato ket è quindi quella di distruggere una particella che si trova nello stato $|\nu\rangle$, da cui il nome di operatore di distruzione. Analizziamo il comportamento di a_ν .

$$a_\nu |\nu_N \dots \nu_{r+1} \nu_r \nu_{r-1} \dots \nu_1\rangle = |\nu_N \dots \nu_{r+1} \nu_{r-1} \dots \nu_1\rangle (-)^{r-1} \quad \text{se } \nu = \nu_r \quad (2.25)$$

Dato che, per definizione, nello stato vuoto non ci sono particelle, si ha che:

$$a_\nu |0\rangle = 0. \quad (2.26)$$

Quindi se il vettore $|\nu_N \dots \nu_1\rangle$ non contiene lo stato ν allora

$$a_\nu |\nu_N \dots \nu_1\rangle = 0. \quad (2.27)$$

Anche nel caso degli operatori di distruzione, utilizzando le metodologie descritte per gli operatori di creazione, si può dimostrare che:

$$a_{\nu_1} a_{\nu_2} = -a_{\nu_2} a_{\nu_1} \quad \text{quindi} \quad (a_\nu)^2 = 0. \quad (2.28)$$

Allo stesso modo si può anche dimostrare che, per $\nu_1 \neq \nu_2$, si ha:

$$a_{\nu_1} a_{\nu_2}^\dagger = -a_{\nu_2}^\dagger a_{\nu_1}. \quad (2.29)$$

Utilizzando le proprietà precedentemente mostrate si ottiene:

$$a_\nu a_\nu^\dagger |\nu_N \dots \nu_1\rangle = \begin{cases} 0 & \text{se } \nu \in S \\ |\nu_N \dots \nu_1\rangle & \text{se } \nu \notin S \end{cases} \quad S = \{\nu_N \dots \nu_1\} \quad (2.30)$$

$$a_\nu^\dagger a_\nu |\nu_N \dots \nu_1\rangle = \begin{cases} |\nu_N \dots \nu_1\rangle & \text{se } \nu \in S \\ 0 & \text{se } \nu \notin S \end{cases} \quad (2.31)$$

Dalle equazioni (2.30) e (2.31) si ha che:

$$(a_\nu a_\nu^\dagger + a_\nu^\dagger a_\nu) |\nu_N \dots \nu_1\rangle = |\nu_N \dots \nu_1\rangle. \quad (2.32)$$

Questa equazione è valida per qualsiasi vettore $|\nu_N \dots \nu_1\rangle$ dato che uno dei due addendi darà risultato nullo, mentre l'altro produrrà il vettore di partenza.

L'eq. (2.31) definisce l'operatore numero di occupazione:

$$n_\nu = a_\nu^\dagger a_\nu \quad (2.33)$$

i cui autovalori sono 1 o 0 se lo stato a multicorpi a cui è applicato contiene o no lo stato di singola particella ν .

La relazione operatoriale data dalle (2.30) e (2.31) è:

$$a_\nu a_\nu^\dagger + a_\nu^\dagger a_\nu = 1 \quad (2.34)$$

Le relazioni (2.16), (2.28), (2.29) che definiscono le proprietà degli operatori di creazione e di distruzione, possono essere sintetizzate come:

$$\{a_\nu, a_{\nu'}^\dagger\} = \delta_{\nu\nu'} \quad \{a_\nu, a_{\nu'}\} = 0 \quad \{a_\nu^\dagger, a_{\nu'}^\dagger\} = 0, \quad (2.35)$$

dove il simbolo $\{, \}$ indica l'operatore di anticommutazione.

Nel caso di sistemi a multicorpi descrivibili con simmetria sferica è utile lavorare con tensori sferici irriducibili. A questo scopo si utilizzano operatori di creazione e distruzione leggermente modificati come indicato in Appendice A.

2.3 Operatori ad uno o a due corpi

La corrispondenza tra vettori nella RNO e vettori nello spazio delle configurazioni può essere spinta più avanti per trovare una corrispondenza tra operatori.

Chiamiamo $|S\rangle$ e $|S'\rangle$ due vettori nella RNO e $|\Phi_S\rangle$ e $|\Phi_{S'}\rangle$ i due corrispondenti determinanti di Slater. Considero nello spazio delle configurazioni un qualsiasi operatore a molti corpi $O_S(x_1 \dots x_N)$. Si ottiene l'espressione corrispondente O di questo operatore nella RNO imponendo l'uguaglianza degli elementi di matrice:

$$\langle \Phi_{S'} | O_S | \Phi_S \rangle = \langle S' | O | S \rangle \quad (2.36)$$

Nello studio dei problemi a multicorpi gli operatori che si incontrano più frequentemente sono quelli a uno e due corpi.

Nello spazio delle coordinate, un operatore a un corpo è dato dalla somma di operatori che dipendono solo da una coordinata;

$$O^I(x_1 \dots x_N) = \sum_{i=1}^N o^I(x_i) \quad (2.37)$$

L'energia cinetica è un tipico operatore a un corpo.

Utilizzo per semplicità una base di funzioni d'onda di singola particella in cui O^I è diagonale

$$o^I(x)\phi_\nu(x) = \omega_\nu\phi_\nu(x). \quad (2.38)$$

Utilizzando il determinante di Slater formato dalle ϕ_ν si ha che:

$$\begin{aligned} O^I(x_1 \dots x_N)\Phi_S(x_1 \dots x_N) &= \\ &= \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_P (-)^P \sum_{i=1}^N o^I(x_i) P\phi_{\nu_1}(x_1) \dots \phi_{\nu_N}(x_N) = \\ &= \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_P (-)^P \sum_{i=1}^N P o^I(x_i) \phi_{\nu_1}(x_1) \dots \phi_{\nu_N}(x_N) \\ &= \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_P (-)^P \sum_{i=1}^N (\omega_{\nu_i} P\phi_{\nu_1}(x_1) \dots \phi_{\nu_N}(x_N)) \\ &= \sum_{i=1}^N \omega_{\nu_i} \Phi_S = \sum_{\nu \text{ occupati}} \omega_\nu \Phi_S = \sum_{\nu} \omega_\nu n_\nu \Phi_S \end{aligned} \quad (2.39)$$

Dove ho indicato con P l'operatore che effettua tutte le possibili permutazioni. Nel risultato precedente $n_\nu = 1$ per i livelli occupati e $n_\nu = 0$ per quelli non occupati. Il calcolo dell'elemento di matrice diventa:

$$\langle \Phi_{S'} | O^I | \Phi_S \rangle = \sum_{\nu} \omega_\nu n_\nu \langle \Phi_{S'} | \Phi_S \rangle = \quad (2.40)$$

$$= \sum_{\nu} \omega_\nu \langle S' | n_\nu | S \rangle = \langle S' | O^I | S \rangle \quad (2.41)$$

dove è stato usato l'operatore numero di occupazione definito in eq. (2.31). Sostituendo si ha che:

$$\langle S' | O^I | S \rangle = \langle S' | \sum_{\nu} \omega_\nu a_\nu^+ a_\nu | S \rangle \quad (2.42)$$

da cui:

$$O^I = \sum_{\nu\nu} \omega_{\nu\nu} a_\nu^+ a_\nu \quad (2.43)$$

dove

$$\omega_{\nu\nu'} = \int d^3r \phi_{\nu'}^*(\mathbf{r}) o^I(\mathbf{r}) \phi_{\nu}(\mathbf{r}). \quad (2.44)$$

Riferendosi ad una base qualsiasi l'operatore ad un corpo può essere scritto come:

$$O^I = \sum_{\nu\nu'} O_{\nu\nu'}^I a_{\nu}^+ a_{\nu'} \quad (2.45)$$

$$O_{\nu\nu'}^I = \int d^3x \phi_{\nu'}^*(\mathbf{x}) o^I(\mathbf{x}) \phi_{\nu}(\mathbf{x}) \equiv \langle \nu | o^I | \nu' \rangle \quad (2.46)$$

Questa equazione mostra che l'operatore ad un corpo distrugge una particella in ν' e ne crea una nel livello ν . È ovvio che ν' deve essere occupato e ν vuoto. Quindi l'operatore può creare una coppia particella-buca. Nel caso in cui $|S\rangle = |S'\rangle$ i soli contributi non nulli sono quelli in cui $\nu' = \nu$.

La stessa procedura può essere utilizzata per ottenere l'espressione in RNO degli operatori a due corpi, definiti come somma di operatori che dipendono da due coordinate:

$$O^{II}(x_1 \dots x_N) = \sum_{i < j} o^{II}(x_i, x_j) = \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} o^{II}(x_i, x_j) \quad (2.47)$$

Un tipico esempio di operatore a due corpi è il potenziale d'interazione $V = \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} V(x_i, x_j)$. Operatori di questo tipo nella RNO si esprimono come:

$$O^{II} = \frac{1}{2} \sum_{\nu\nu'\mu\mu'} O_{\nu\mu\nu'\mu'}^{II} a_{\nu}^+ a_{\mu}^+ a_{\mu'} a_{\nu'}, \quad (2.48)$$

in cui abbiamo definito:

$$O_{\nu\mu\nu'\mu'}^{II} = \langle \nu\mu | O^{II} | \nu'\mu' \rangle = \int dx dx' \phi_{\nu}^*(x) \phi_{\mu}^*(x') o^{II}(x, x') \phi_{\nu'}(x) \phi_{\mu'}(x') \quad (2.49)$$

Da notare l'ordine degli operatori e degli indici.

In questo caso, l'operatore distrugge due particelle al di sotto della superficie di Fermi e ne crea due al di sopra.

2.4 Operatori di campo

Gli operatori di creazione a_{ν}^+ e distruzione a_{ν} si riferiscono a una base specifica i cui stati di particella singola sono caratterizzati dai numeri quantici ν . Si può passare ad una rappresentazione indipendente dalla base utilizzando gli operatori di campo.

$$\psi(\mathbf{r}) = \sum_{\nu} a_{\nu} \phi_{\nu}(\mathbf{r}) \quad \text{distrugge una particella nel punto } \mathbf{r} \quad (2.50)$$

$$\psi^+(\mathbf{r}) = \sum_{\nu} a_{\nu}^+ \phi_{\nu}^*(\mathbf{r}) \quad \text{crea una particella nel punto } \mathbf{r}. \quad (2.51)$$

Nota che ϕ è una funzione d'onda di singola particella, mentre ψ^+ e ψ sono operatori che creano e distruggono una particella nel punto \mathbf{r} .

Le equazioni precedenti possono essere invertite per esprimere gli operatori di creazione e di distruzione in funzione degli operatori di campo.

$$a_{\nu} = \int d^3r \phi_{\nu}^*(\mathbf{r}) \psi(\mathbf{r}) \quad \text{e} \quad a_{\nu}^+ = \int d^3r \phi_{\nu}(\mathbf{r}) \psi^+(\mathbf{r}) \quad (2.52)$$

Utilizzando le proprietà di anticommutazione(2.35) degli operatori di creazione e distruzione, si ottengono analoghe relazioni per gli operatori di campo:

$$\{\psi^+(\mathbf{r}), \psi^+(\mathbf{r}')\} = 0 \quad \{\psi(\mathbf{r}), \psi(\mathbf{r}')\} = 0 \quad \{\psi^+(\mathbf{r}), \psi(\mathbf{r}')\} = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \quad (2.53)$$

Gli operatori a uno o due corpi possono essere espressi in termini di operatori di campo come:

$$O^I = \int d^3r \psi^+(\mathbf{r}) o^I(\mathbf{r}) \psi(\mathbf{r}) \quad (2.54)$$

$$O^{II} = \frac{1}{2} \int d^3r d^3r' \psi^+(\mathbf{r}) \psi^+(\mathbf{r}') O^{II}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \psi(\mathbf{r}') \psi(\mathbf{r}) \quad (2.55)$$

L'operatore hamiltoniano può essere espresso come:

$$H = T + V = \sum_{\nu\nu'} \langle \nu | T | \nu' \rangle a_\nu^\dagger a_{\nu'} + \frac{1}{2} \sum_{\nu\nu'\mu\mu'} \langle \nu\mu | V | \nu'\mu' \rangle a_\nu^\dagger a_\mu^\dagger a_{\mu'} a_{\nu'} \quad (2.56)$$

$$= \int d^3r \psi^+(\mathbf{r}) \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \right) \psi(\mathbf{r}) + \frac{1}{2} \int d^3r d^3r' \psi^+(\mathbf{r}) \psi^+(\mathbf{r}') V(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \psi(\mathbf{r}') \psi(\mathbf{r}). \quad (2.57)$$

Capitolo 3

Teoria perturbativa dei sistemi a molti corpi

3.1 Rappresentazioni

I valori degli osservabili in meccanica quantistica sono ottenuti calcolando elementi di matrice di operatori. Queste quantità sono invarianti se si applica la stessa trasformazione unitaria agli stati e agli operatori. Queste trasformazioni unitarie possono contenere il tempo e, per esempio, possono trasformare gli stati $|\Psi_S(t)\rangle$ in stati indipendenti dal tempo. In questo caso la dipendenza temporale sarà inserita nella definizione degli operatori. Queste trasformazioni unitarie dipendenti dal tempo definiscono quelle che sono chiamate *rappresentazioni* della Meccanica Quantistica.

Rappresentazione di Schrödinger

La rappresentazione più comune è quella di Schrödinger in cui i vettori che descrivono lo stato del sistema sono dipendenti dal tempo, mentre gli operatori sono indipendenti dal tempo. In questa rappresentazione, l'evoluzione temporale del sistema è descritta dall'equazione:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\Psi_S(t)\rangle = H |\Psi_S(t)\rangle, \quad (3.1)$$

detta appunto equazione di Schrödinger.

Per sistemi in cui l'energia è conservata, l'operatore hamiltoniano H non dipende esplicitamente dal tempo. In questo caso la soluzione formale della (3.1) è:

$$|\Psi_S(t)\rangle = e^{-i \frac{H(t-t_0)}{\hbar}} |\Psi_S(t_0)\rangle. \quad (3.2)$$

In questa equazione è presente la funzione esponenziale di un operatore. L'azione di questa funzione sullo stato $|\Psi_S(t_0)\rangle$ è definita in termini dello sviluppo in serie dell'esponenziale. Inoltre, dato che H è un operatore hermitiano, e^{iH} è unitario.

L'equazione (3.2) permette di costruire la soluzione dell'eq. di Schrödinger ad un qualsiasi tempo t una volta noto lo stato del sistema ad un tempo t_0 .

Rappresentazione di Heisenberg

In questa rappresentazione gli stati sono indipendenti dal tempo mentre gli operatori hanno una esplicita dipendenza temporale. Gli stati del sistema in rappresentazione di Heisenberg sono legati a quelli della

rappresentazione di Schrödinger dalla relazione:

$$|\Psi_H(t)\rangle \equiv e^{i\frac{Ht}{\hbar}} |\Psi_S(t)\rangle. \quad (3.3)$$

L'evoluzione temporale degli stati in rappresentazione di Heisenberg è data da:

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\Psi_H(t)\rangle &= -He^{i\frac{Ht}{\hbar}} |\Psi_S(t)\rangle + e^{i\frac{Ht}{\hbar}} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\Psi_S(t)\rangle = \text{per la (3.1)} \\ &= -He^{i\frac{Ht}{\hbar}} |\Psi_S(t)\rangle + He^{i\frac{Ht}{\hbar}} |\Psi_S(t)\rangle = 0 \end{aligned} \quad (3.4)$$

da cui risulta che $|\Psi_H\rangle$ è indipendente dal tempo.

Per ottenere la relazione che descrive gli operatori nella rappresentazione di Heisenberg in termini degli operatori in rappresentazione di Schrödinger è conveniente uguagliare gli elementi di matrice espressi nelle due rappresentazioni:

$$\langle \Psi_S(t) | O_S | \Psi_S(t) \rangle = \langle \Psi_H | e^{i\frac{Ht}{\hbar}} O_S e^{-i\frac{Ht}{\hbar}} | \Psi_H \rangle, \quad (3.5)$$

da cui si ottiene la definizione:

$$O_H \equiv e^{i\frac{Ht}{\hbar}} O_S e^{-i\frac{Ht}{\hbar}} \quad (3.6)$$

L'evoluzione temporale dell'operatore dà l'equazione del moto:

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} O_H(t) &= -He^{i\frac{Ht}{\hbar}} O_S e^{-i\frac{Ht}{\hbar}} + e^{i\frac{Ht}{\hbar}} O_S H e^{-i\frac{Ht}{\hbar}} = \\ &= -HO_H + O_H H = [O_H, H] \end{aligned} \quad (3.7)$$

dove si è sfruttato il fatto che H e $e^{i\frac{Ht}{\hbar}}$ commutano. In generale, O_H e H non commutano. Se commutano l'equazione (3.7) implica che O_H sia una costante del moto.

Rappresentazione di interazione

Questa rappresentazione intermedia tra quella di Heisenberg e quella di Schrödinger è quella di maggior interesse nella descrizione di sistemi a multicorpi.

Supponiamo che l'hamiltoniana sia indipendente dal tempo e possa essere suddivisa in due termini:

$$H = H_0 + H_1. \quad (3.8)$$

Definiamo un vettore di stato in rappresentazione di interazione come:

$$|\Psi_I(t)\rangle \equiv e^{i\frac{H_0 t}{\hbar}} |\Psi_S(t)\rangle. \quad (3.9)$$

Lo sviluppo temporale dello stato $|\Psi_I(t)\rangle$ è dato da:

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\Psi_I(t)\rangle &= -H_0 e^{i\frac{H_0 t}{\hbar}} |\Psi_S(t)\rangle + e^{i\frac{H_0 t}{\hbar}} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\Psi_S(t)\rangle \\ &= e^{i\frac{H_0 t}{\hbar}} [-H_0 + H_0 + H_1] e^{-i\frac{H_0 t}{\hbar}} e^{i\frac{H_0 t}{\hbar}} |\Psi_S(t)\rangle = \\ &= e^{i\frac{H_0 t}{\hbar}} H_1 e^{-i\frac{H_0 t}{\hbar}} |\Psi_I(t)\rangle = H_{1,I}(t) |\Psi_I(t)\rangle \end{aligned} \quad (3.10)$$

Bisogna considerare che in generale H_1 e H_0 non commutano.

Anche in questo caso, l'espressione degli operatori in rappresentazione di interazione in termini di operatori in rappresentazione Schrödinger può essere ottenuta eguagliando due elementi di matrice arbitrari nelle due rappresentazioni:

$$\langle \Psi_S(t) | O_S | \Psi_S(t) \rangle = \langle \Psi_I | e^{+i\frac{H_0 t}{\hbar}} O_S e^{-i\frac{H_0 t}{\hbar}} | \Psi_I \rangle \quad (3.11)$$

da cui si ottiene la definizione:

$$O_I(t) = e^{i\frac{H_0 t}{\hbar}} O_S e^{-i\frac{H_0 t}{\hbar}} \quad (3.12)$$

Dalle equazioni precedenti appare chiaro che nella rappresentazione di interazione, sia gli operatori che gli stati dipendono dal tempo. L'equazione del moto in rappresentazione di interazione è:

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} O_I(t) &= -H_0 e^{i\frac{H_0 t}{\hbar}} O_S e^{-i\frac{H_0 t}{\hbar}} + e^{i\frac{H_0 t}{\hbar}} O_S H_0 e^{-i\frac{H_0 t}{\hbar}} \\ &= e^{i\frac{H_0 t}{\hbar}} O_S e^{-i\frac{H_0 t}{\hbar}} H_0 - H_0 e^{i\frac{H_0 t}{\hbar}} O_S e^{-i\frac{H_0 t}{\hbar}} \\ &= O_I H_0 - H_0 O_I = [O_I(t), H_0] \end{aligned} \quad (3.13)$$

Ricaviamo le espressioni degli operatori di creazione e di distruzione in rappresentazione di interazione. Per semplificare il calcolo considero una situazione in cui H_0 sia un operatore ad un corpo e la base è diagonale.

$$H_0 = \sum_k \hbar \omega_k a_k^+ a_k \quad (3.14)$$

L'equazione del moto per un operatore di distruzione in rappresentazione di interazione è:

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{d}{dt} a_{I,k}(t) &= e^{i\frac{H_0 t}{\hbar}} [a_{S,k}, H_0] e^{-i\frac{H_0 t}{\hbar}} = e^{i\frac{H_0 t}{\hbar}} \left[a_{S,k}, \sum_{k'} \hbar \omega_{k'} a_{S,k'}^+ a_{S,k'} \right] e^{-i\frac{H_0 t}{\hbar}} \\ &= e^{i\frac{H_0 t}{\hbar}} \sum_{k'} [a_{S,k}, a_{S,k'}^+ a_{S,k'}] e^{-i\frac{H_0 t}{\hbar}} \hbar \omega_{k'} \end{aligned}$$

dove I e S indicano rappresentazioni di interazione e Schrödinger rispettivamente. Il termine tra parentesi diventa (tralasciando il pedice S):

$$[a_k a_{k'}^+ a_{k'} - a_{k'}^+ (-a_k a_{k'})] = [a_k a_{k'}^+ a_{k'} - (-\delta_{kk'} a_{k'} + a_k a_{k'}^+ a_{k'})] = a_k$$

Si ha quindi:

$$i\hbar \frac{d}{dt} a_{k,I}(t) = \hbar \omega_k a_{k,I}(t) \quad (3.15)$$

da cui, ipotizzando $a_I(t=0) = a_S$ ottengo

$$a_{I,k}(t) = a_{S,k} e^{-i\omega_k t} \quad (3.16)$$

Per l'aggiunto si ottiene:

$$a_{I,k}^+(t) = a_{S,k}^+ e^{i\omega_k t} \quad (3.17)$$

Siccome la dipendenza temporale è presente solo nella fase complessa, le proprietà di (anti)commutazione degli operatori di creazione e distruzione risultano identiche nelle rappresentazioni di interazione e di Schrödinger. Abbiamo visto che, in rappresentazione di Schrödinger ogni operatore può essere rappresentato in termini di a_k e a_k^+ . Per ottenere l'espressione dell'operatore in rappresentazione d'interazione basta sostituire a_k con $a_{I,k}(t)$ e analogamente con gli operatori di creazione. Anche gli operatori di campo sono esprimibili in termini di a_k e a_k^+ , e quindi la loro espressione in rappresentazione di interazione può essere ottenuta applicando la stessa regola empirica.

3.2 Operatore di evoluzione temporale

Definiamo un operatore $U(t, t_0)$, detto di evoluzione temporale, che determina il vettore di stato al tempo t una volta noto il vettore di stato al tempo t_0 .

$$|\Psi_I(t)\rangle = U(t, t_0)|\Psi_I(t_0)\rangle \quad (3.18)$$

Dalla definizione di stato in rappresentazione di interazione e dall'equazione (3.2) si ha:

$$\begin{aligned} |\Psi_I(t)\rangle &= e^{i\frac{H_0 t}{\hbar}} |\Psi_S(t)\rangle = e^{i\frac{H_0 t}{\hbar}} e^{-i\frac{H}{\hbar}(t-t_0)} |\Psi_S(t_0)\rangle \\ &= e^{i\frac{H_0 t}{\hbar}} e^{-i\frac{H}{\hbar}(t-t_0)} e^{-i\frac{H_0 t_0}{\hbar}} |\Psi_I(t_0)\rangle \end{aligned}$$

da cui:

$$U(t, t_0) = e^{i\frac{H_0 t}{\hbar}} e^{-i\frac{H(t-t_0)}{\hbar}} e^{-i\frac{H_0 t_0}{\hbar}} \quad (3.19)$$

Le proprietà di $U(t, t_0)$ vengono dedotte dalle equazioni precedenti. Ad esempio:

$$U(t_0, t_0) = 1, \quad (3.20)$$

e anche:

$$U^+(t, t_0)U(t, t_0) = U(t, t_0)U^+(t, t_0) = 1 \quad (3.21)$$

che implica:

$$U^+(t, t_0) = U^{-1}(t, t_0) \quad (3.22)$$

$$U(t_1, t_2)U(t_2, t_3) = U(t_1, t_3) \quad (3.23)$$

$$U(t, t_0)U(t_0, t) = 1 \quad \text{che implica} \quad U(t_0, t) = U^+(t, t_0). \quad (3.24)$$

L'equazione (3.19) non è molto utile per il calcolo di osservabili. Dal punto di vista della complessità di calcolo, risolvere l'eq. (3.18) utilizzando l'espressione (3.19) equivale a risolvere l'equazione di Schrödinger. Per superare questo problema è conveniente utilizzare un'espressione integrale di $U(t, t_0)$.

Riscrivo l'equazione (3.10)

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\Psi_I(t)\rangle = H_1(t) |\Psi_I(t)\rangle \quad (3.25)$$

e, usando la (3.18) ottengo:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} U(t, t_0) |\Psi_I(t_0)\rangle = H_1(t) U(t, t_0) |\Psi_I(t_0)\rangle. \quad (3.26)$$

Dato che $|\Psi_I(t_0)\rangle$ è costante nel tempo si ha l'equazione operatoriale:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} U(t, t_0) = H_1(t) U(t, t_0) \quad (3.27)$$

e integrando da t_0 a t si ottiene:

$$\begin{aligned} \int_{t_0}^t i\hbar \frac{\partial}{\partial t'} U(t', t_0) dt' &= \int_{t_0}^t H_1(t') U(t', t_0) dt' \\ = i\hbar [U(t, t_0) - U(t_0, t_0)] &= \int_{t_0}^t dt' H_1(t') U(t', t_0). \end{aligned}$$

Considerando l'equazione (3.20) si ha:

$$U(t, t_0) = 1 - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t dt' H_1(t') U(t', t_0) \quad (3.28)$$

La soluzione formale dell'equazione (3.28) si ottiene sostituendo al posto di $U(t', t_0)$ l'equazione stessa:

$$\begin{aligned} U(t, t_0) &= 1 - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t dt' H_1(t') \left[1 - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^{t'} dt'' H_1(t'') [1 - \dots] \right] \\ U(t, t_0) &= 1 - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t dt' H_1(t') + \left(\frac{-i}{\hbar}\right)^2 \int_{t_0}^t dt' \int_{t_0}^{t'} dt'' H_1(t') H_1(t'') + \dots \end{aligned} \quad (3.29)$$

$t > t'$

Consideriamo il terzo termine dell'equazione:

$$\int_{t_0}^t dt' \int_{t_0}^{t'} dt'' H_1(t') H_1(t'') = 1/2 \int_{t_0}^t dt' \int_{t_0}^{t'} dt'' H_1(t') H_1(t'') + 1/2 \int_{t_0}^t dt'' \int_{t_0}^{t''} dt' H_1(t'') H_1(t') \quad (3.30)$$

$t' > t''$ $t'' > t'$

Nella parte destra dell'equazione (3.30) ho cambiato solo l'ordine degli indici muti. Dato che in generale si ha che:

$$\int_a^b dy \int_y^b dx f(x) f(y) = \int_a^b dx \int_a^x dy f(x) f(y) \quad (3.31)$$

l'eq. (3.30) può essere scritta come segue:

$$\begin{aligned} \int_{t_0}^t dt' \int_{t_0}^{t'} dt'' H_1(t') H_1(t'') &= \\ \frac{1}{2} \int_{t_0}^t dt' \int_{t_0}^{t'} dt'' H_1(t') H_1(t'') &+ \frac{1}{2} \int_{t_0}^t dt' \int_{t'}^t dt'' H_1(t'') H_1(t') = \\ \frac{1}{2} \int_{t_0}^t dt' \int_{t_0}^{t'} dt'' [H_1(t') H_1(t'') \theta(t' - t'') &+ H_1(t'') H_1(t') \theta(t'' - t')] = \\ \frac{1}{2} \int_{t_0}^t dt' \int_{t_0}^{t'} dt'' T [H_1(t') H_1(t'')] & \end{aligned} \quad (3.32)$$

dove abbiamo introdotto l'operatore di ordinamento temporale $T[H_1(t') H_1(t'')]$ la cui azione consiste nel sistemare in ordine di tempo decrescente da sinistra a destra gli operatori su cui agisce.

Generalizzando il risultato (3.32) per un termine qualsiasi, si ottiene per l'eq. (3.29) l'espressione

$$U(t, t_0) = \sum_{n=0}^{\infty} \left(\frac{-i}{\hbar}\right)^n \frac{1}{n!} \int_{t_0}^t dt_1 \dots \int_{t_0}^{t_1} dt_n T [H_1(t_1) \dots H_1(t_n)]. \quad (3.33)$$

Dimostrazione della (3.31). Definisco

$$\frac{dF(x)}{dx} = f(x)$$

Considero il primo termine della (3.31).

$$\begin{aligned} \int_a^b dy \int_y^b dx f(x) f(y) &= \int_a^b dy f(y) [F(b) - F(y)] = F(b) [F(b) - F(a)] - \int_a^b dy f(y) F(y) \\ &= F(b) [F(b) - F(a)] - \int_a^b dy \frac{1}{2} \frac{d}{dy} [F(y)]^2 = F^2(b) - F(b)F(a) - \frac{1}{2} [F^2(b) - F^2(a)] \\ &= \frac{1}{2} F^2(b) + \frac{1}{2} F^2(a) - F(b)F(a) = \frac{1}{2} [F(b) - F(a)]^2 \end{aligned}$$

Il secondo termine della (3.31) è

$$\begin{aligned} \int_a^b dx \int_a^x dy f(x) f(y) &= \int_a^b dx f(x) [F(x) - F(a)] = \int_a^b dx f(x) F(x) - F(a) [F(b) - F(a)] \\ &= \int_a^b dx \frac{1}{2} \frac{d}{dx} [F(x)]^2 - F(a)F(b) + F^2(a) = \frac{1}{2} [F^2(b) - F^2(a)] - F(a)F(b) + F^2(a) \\ &= \frac{1}{2} F^2(b) + \frac{1}{2} F^2(a) - F(b)F(a) = \frac{1}{2} [F(b) - F(a)]^2 \end{aligned}$$

3.3 Teorema di Wick

Prima di considerare l'uso dell'operatore di evoluzione temporale nell'ambito dello sviluppo perturbativo presenterò un teorema estremamente utile per calcolare valori di aspettazione di operatori espressi in seconda quantizzazione.

Operatore di ordinamento temporale T

Ho già introdotto nell'equazione (3.32) l'operatore di ordinamento temporale

$$T[ABC\dots], \tag{3.34}$$

che ordina gli operatori di creazione e distruzione in modo da avere i tempi più grandi a sinistra. Nell'effettuare questo ordinamento bisogna considerare una fase negativa per ogni scambio tra due operatori.

Ad esempio, supponendo $t_{n+1} < t_n$ si ha che:

$$T[a(t_3)a^+(t_1)a^+(t_2)] = a^+(t_1)a^+(t_2)a(t_3). \tag{3.35}$$

Un altro esempio:

$$T[a(t_2)a^+(t_1)a^+(t_3)] = -a^+(t_1)a(t_2)a^+(t_3). \tag{3.36}$$

Prodotto normale ordinato N

L'azione di questo operatore su un insieme di operatori di creazione e distruzione è quella di ordinarli in modo tale che il loro valore medio sullo stato fondamentale sia zero.

L'ordinamento Normale dipende quindi dalla definizione di stato fondamentale del sistema.

Considero come stato fondamentale il vuoto fisico $|0\rangle$, cioè uno stato privo di particelle. In questo caso l'azione dell'operatore Prodotto Normale Ordinato è quella di sistemare a destra gli operatori di distruzione e a sinistra quelli di creazione, questo perchè $a|0\rangle = 0$, e $\langle 0|a^+ = 0$.

Ad esempio:

$$N[a_1 a_2^+ a_3 a_4^+] = -a_2^+ a_4^+ a_1 a_3 . \quad (3.37)$$

Questo è il modo in cui il Prodotto Normale Ordinato viene utilizzato in teoria dei campi.

Nel caso della descrizione di sistemi a molti corpi, è molto più conveniente considerare come stato fondamentale del sistema, non tanto lo stato di vuoto $|0\rangle$ ma piuttosto lo stato fondamentale di campo medio $|\Phi_0\rangle$ in cui tutti i livelli al di sotto della superficie di Fermi (stati buca) sono occupati e quelli sopra (stati particella) sono vuoti. L'azione di N sugli operatori di creazione e distruzione è più complessa che nel caso precedente. Indicando, come è tradizione, con le lettere $(ijkl)$ gli stati buca e con $(mnpq)$ gli stati particella si ha:

$$\begin{aligned} a_j |\Phi_0\rangle &\neq 0 \quad \text{ma} \quad a_m |\Phi_0\rangle = 0 \\ a_j^+ |\Phi_0\rangle &= 0 \quad \text{ma} \quad a_m^+ |\Phi_0\rangle \neq 0 . \end{aligned} \quad (3.38)$$

In questo caso l'azione del Prodotto Normale Ordinato consiste nello spostare a destra gli a_m e gli a_j^+ , e nello spostare a sinistra a_j e a_m^+ . Ovviamente questo viene fatto considerando tutti i segni negativi generati dalle varie permutazioni dell'ordine degli operatori. Ad esempio:

$$N[a_m a_j^+ a_j a_m^+] = a_j a_m^+ a_m a_j^+ . \quad (3.39)$$

ContraZIONE

L'operazione di contrazione tra due operatori viene definita come la differenza tra Operatore Temporale T e Prodotto Normale Ordinato N .

$$\overline{AB} \equiv T[AB] - N[AB] . \quad (3.40)$$

Identificherò i due operatori a cui intendo applicare l'operazione di contrazione con una linea che li collega.

Se gli operatori sono indipendenti dal tempo, o se sono definiti allo stesso tempo si ha:

$$T[AB] = AB . \quad (3.41)$$

Consideriamo come esempio la contrazione di un operatore di creazione di particella con l'operatore distruzione di uno stato buca:

$$\overline{a_m^+ a_i} = T[a_m^+ a_i] - N[a_m^+ a_i] = a_m^+ a_i - a_m^+ a_i = 0 . \quad (3.42)$$

Il risultato dell'operazione di contrazione non è un operatore, ma un numero. Questo fatto discende dalle regole di anticommutazione degli operatori di creazione e di distruzione. In realtà la contrazione è strettamente legata al commutatore di due di questi operatori.

Si può dimostrare che la contrazione è il valore di aspettazione dei due operatori sullo stato fondamentale:

$$\langle \Phi_0 | \overline{AB} | \Phi_0 \rangle = \langle \Phi_0 | \overline{AB} | \Phi_0 \rangle + \langle \Phi_0 | N[AB] | \Phi_0 \rangle = \overline{AB} \langle \Phi_0 | \Phi_0 \rangle , \quad (3.43)$$

dove abbiamo sfruttato il fatto che $\langle \Phi_0 | N[AB] | \Phi_0 \rangle$ è nullo.

In un gruppo di più operatori con più di una contrazione, la coppia di operatori che verrà contratta deve essere sistemata con gli operatori uno accanto all'altro e il segno deve tenere conto delle varie permutazioni.

Esempio:

$$\overline{ABCDEF} = -\overline{ACBFDE} . \quad (3.44)$$

Formulazione del teorema di Wick

Il teorema Wick afferma che un prodotto di operatori può essere scritto come somma di Prodotti Normali Ordinati in cui tutte le possibili contrazioni sono effettuate:

$$\begin{aligned}
 T[ABC \dots Z] = N[ABC \dots Z] &+ N[\overline{AB} \dots Z] + N[\overline{ABC} \dots Z] \\
 &+ N[\overline{ABCD} \dots Z] + N[\overline{ABCD} \dots Z] \\
 &+ N[\overline{ABCD} \dots Z] + \dots .
 \end{aligned}$$

Dato che il risultato dell'operazione di contrazione è un numero, tutti gli operatori contratti non sono soggetti all'azione di N .

Ad esempio, il teorema di Wick applicato al prodotto di quattro operatori dà:

$$\begin{aligned}
 ABCD &= N[ABCD] + N[\overline{ABCD}] + N[\overline{ABCD}] + N[\overline{ABCD}] \\
 &+ N[\overline{ABCD}] + N[\overline{ABCD}] + N[\overline{ABCD}] \\
 &+ N[\overline{ABCD}] + N[\overline{ABCD}] + N[\overline{ABCD}] \\
 &= N[ABCD] + \overline{AB} N[CD] - \overline{AC} N[BD] + \overline{AD} N[BC] \\
 &+ \overline{BC} N[AD] - \overline{BD} N[AC] + \overline{CD} N[AB] \\
 &+ \overline{ABCD} - \overline{ACBD} + \overline{ADBC} .
 \end{aligned} \tag{3.45}$$

Dall'espressione ricavata sopra appare chiaro che il calcolo del valore di aspettazione di questi operatori rispetto allo stato fondamentale è ridotto al solo calcolo delle contrazioni. Questo perché per definizione i valori di aspettazione dei termini contenenti N sono nulli.

3.4 Accensione adiabatica dell'interazione

L'accensione adiabatica dell'interazione è un espediente matematico che permette di descrivere gli autostati di un sistema di particelle interagenti in termini di autostati di un sistema di particelle non interagenti. Questo è ovviamente molto utile dato che si presume si sappia descrivere perfettamente il sistema di particelle non interagenti.

Si introduce una hamiltoniana del tipo:

$$H = H_0 + e^{-\epsilon|t|} H_1 , \tag{3.46}$$

in cui ϵ è un numero reale positivo. Ovviamente:

$$\lim_{t \rightarrow \pm\infty} H = H_0 , \tag{3.47}$$

e al tempo $t = 0$ l'hamiltoniana corrisponde all'intera hamiltoniana:

$$\lim_{t \rightarrow 0} H = H_0 + H_1 . \tag{3.48}$$

Il parametro ϵ può essere scelto in modo da accendere e spegnere lentamente a piacere la perturbazione. I risultati devono essere indipendenti da ϵ .

Gli autostati dell'hamiltoniana (3.46) in rappresentazione d'interazione sono espressi come:

$$|\Psi_I(t)\rangle = U_\epsilon(t, t_0)|\Psi_I(t_0)\rangle . \quad (3.49)$$

Il pedice ϵ è stato aggiunto all'operatore di evoluzione temporale U dato che ora, nella sua definizione, eq. (3.19), al posto di $H_1(t)$ bisogna sostituire $e^{-\epsilon|t|}H_1(t)$.

L'equazione (3.33) che esprime l'operatore di evoluzione temporale in termini perturbativi diventa:

$$U_\epsilon(t, t_0) = \sum_{n=0}^{\infty} \left(\frac{-i}{\hbar}\right)^n \frac{1}{n!} \int_{t_0}^t dt_1 \dots \int_{t_0}^t dt_n e^{-\epsilon[|t_1|+|t_2|+\dots]} T[H_1(t_1) \dots H_1(t_n)] , \quad (3.50)$$

dove i termini esponenziali sono stati estratti da T dato che commutano con H_1 .

Riscriviamo l'eq. (3.10) del moto per un sistema descritto dall'hamiltoniana (3.46).

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\Psi_I(t)\rangle = e^{-\epsilon|t|} H_1(t) |\Psi_I(t)\rangle \rightarrow_{t \rightarrow \pm\infty} 0 , \quad (3.51)$$

quindi nel lim $t \rightarrow \pm\infty$ si ha che $|\Psi_I(-\infty)\rangle$ è indipendente dal tempo. Dato che nel lim $t \rightarrow \pm\infty$ l'hamiltoniana si riduce a H_0 si ha che:

$$|\Psi_I(t)\rangle = U_\epsilon(t, -\infty)|\Phi_0\rangle , \quad (3.52)$$

dove $|\Phi_0\rangle$ è l'autostato di H_0 .

Se non ci fosse l'interazione $|\Psi_I\rangle$ sarebbe sempre uguale a $|\Phi_0\rangle$. Al crescere del tempo l'interazione viene accesa, fino a $t = 0$ quando è completamente accesa.

Le definizioni degli stati nelle rappresentazioni di Heisenberg, Schrödinger e interazione determinano gli stati a $t = 0$.

$$|\Psi_H(t)\rangle_{t \rightarrow 0} = \lim_{t \rightarrow 0} e^{i\frac{Ht}{\hbar}} |\Psi_S(t)\rangle = |\Psi_S(0)\rangle \quad (3.53)$$

$$|\Psi_I(t)\rangle_{t \rightarrow 0} = \lim_{t \rightarrow 0} e^{i\frac{H_0 t}{\hbar}} |\Psi_S(t)\rangle = |\Psi_S(0)\rangle \quad (3.54)$$

$$|\Psi_H(0)\rangle = |\Psi_I(0)\rangle = |\Psi_S(0)\rangle , \quad (3.55)$$

da cui:

$$|\Psi_H(0)\rangle = |\Psi_I(0)\rangle = U_\epsilon(0, -\infty)|\Phi_0\rangle . \quad (3.56)$$

L'equazione (3.56) esprime l'autostato di un sistema interagente in termini di un autostato di un sistema non interagente H_0 . Il risultato ottenuto sarà significativo dal punto di vista della fisica se il lim $\epsilon \rightarrow 0$ sarà finito.

A questo quesito risponde il *teorema di Gell-Mann and Low* che afferma che se, ad ogni ordine perturbativo, la seguente entità matematica,

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{U_\epsilon(0, -\infty)|\Phi_0\rangle}{\langle \Phi_0 | U_\epsilon(0, -\infty) | \Phi_0 \rangle} \equiv \frac{|\Psi_0\rangle}{\langle \Phi_0 | \Psi_0 \rangle} , \quad (3.57)$$

esiste, è finita, allora questa è autostato dell'hamiltoniana H :

$$H \frac{|\Psi_0\rangle}{\langle \Phi_0 | \Psi_0 \rangle} = E_0 \frac{|\Psi_0\rangle}{\langle \Phi_0 | \Psi_0 \rangle} . \quad (3.58)$$

Moltiplicando a sinistra per $\langle \Phi_0 |$ ho che:

$$\begin{aligned} \frac{\langle \Phi_0 | H | \Psi_0 \rangle}{\langle \Phi_0 | \Psi_0 \rangle} = E_0 &= \frac{\langle \Phi_0 | H_0 | \Psi_0 \rangle}{\langle \Phi_0 | \Psi_0 \rangle} + \frac{\langle \Phi_0 | H_1 | \Psi_0 \rangle}{\langle \Phi_0 | \Psi_0 \rangle} \\ &= \tilde{E}_0 + \frac{\langle \Phi_0 | H_1 | \Psi_0 \rangle}{\langle \Phi_0 | \Psi_0 \rangle} , \end{aligned}$$

da cui:

$$E_0 - \tilde{E}_0 = \frac{\langle \Phi_0 | H_1 | \Psi_0 \rangle}{\langle \Phi_0 | \Psi_0 \rangle} . \quad (3.59)$$

Il punto essenziale del teorema è che il numeratore e denominatore di (3.57) non esistono separatamente, ma esiste solo il loro rapporto. Il numeratore ha divergenze dell'ordine ϵ^{-1} che vengono cancellate da analoghe divergenze presenti nel denominatore.

Il risultato (3.59) è importante perché dà la differenza di energia tra un sistema interagente e un sistema non interagente. Tutti gli ingredienti per poter calcolare questa quantità sono noti. Per definizione $|\Phi_0\rangle$ è noto e $|\Psi_0\rangle$ può essere calcolato utilizzando l'equazione (3.56). In questa equazione U_ϵ viene calcolato utilizzando lo sviluppo dato dalla (3.33) in cui, il teorema di Wick, permette di valutare il valore di aspettazione dell'operatore T applicato all'interazione che agisce in tempi diversi.

Capitolo 4

Teorema di Goldstone

4.1 Diagrammi di Goldstone

L'analisi dei vari termini dello sviluppo perturbativo è semplificata da tecniche grafiche. Queste tecniche consistono nell'attribuire un simbolo grafico ad ogni elemento dell'equazione che deve essere sviluppata perturbativamente. Ne risulta quindi che ogni termine dello sviluppo è identificato da un diagramma.

Nella teoria relativistica dei campi questi diagrammi sono denominati *diagrammi di Feynmann*. Esiste una serie di regole che permette, partendo da un diagramma di Feynmann, di ricostruire esattamente (fasi comprese) l'espressione del termine perturbativo descritto.

Non è mio interesse, nell'ambito di queste note, arrivare a questa utilizzazione delle tecniche diagrammatiche. Sono piuttosto interessato ad utilizzare le tecniche grafiche come ausilio per identificare termini dello sviluppo perturbativo che hanno caratteristiche simili.

Dato che i diagrammi di Feynmann sono utilizzati nell'ambito relativistico, preferisco denominare i diagrammi utilizzati in meccanica quantistica non relativistica come *diagrammi di Goldstone*.

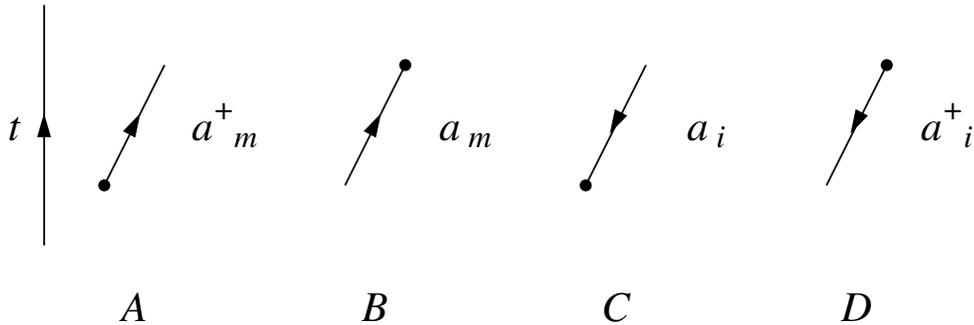


Figura 4.1:

Nella Figura 4.1 sono presentati i vari elementi che compongono il diagramma.

Il diagramma immagina una ideale freccia del tempo orientata dal basso verso l'alto. Nella Figura 4.1 questa linea è stata disegnata, ma nelle altre figure sarà sempre sottintesa.

Una freccia che esce da un punto e si muove nella direzione dei tempi positivi (A nella figura) rappresenta la creazione di una particella. Questo diagramma nella rappresentazione dei momenti, o dei numeri

quantici di funzioni d'onda a simmetria sferica, è collegato all'operatore di creazione a_m^\dagger . Anche qui utilizzo la convenzione di identificare gli stati al di sopra della superficie di Fermi con le lettere m, n, p, q, r , e quelle al di sotto la superficie di Fermi con le lettere i, j, k, l . Nel caso della rappresentazione delle coordinate questo simbolo è legato all'operatore di campo $\psi^+(\mathbf{r})$, che indica la creazione di una particella nel punto \mathbf{r} .

Una freccia che si muove nella direzione dei tempi positivi e scompare in un punto (B nella Figura) rappresenta la distruzione di una particella. A questo diagramma sono associati gli operatori a_m o $\psi(\mathbf{r})$ nella rappresentazione delle coordinate.

Le frecce che si muovono nella direzione contraria a quella della freccia dei tempi (tempi negativi) rappresentano gli stati buco. In meccanica quantistica relativistica, nei diagrammi di Feynmann, queste linee rappresentano le antiparticelle. Nel nostro caso, diagrammi di Goldstone, rappresentano invece stati buca, al di sotto della superficie di Fermi.

In questo caso, la freccia che scompare (C nella Figura) rappresenta la creazione di uno stato buco e gli operatori associati sono a_i^\dagger o $\psi(\mathbf{r})$. Ovviamente la freccia che esce da un punto e si propaga nella direzione dei tempi negativi rappresenta la distruzione di uno stato di buco a_i o $\psi^+(\mathbf{r})$.

L'ultimo elemento grafico necessario a comporre i diagrammi è quello legato all'interazione $V(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$: una linea tratteggiata che unisce due punti, dato che si tratta di un operatore a due corpi.

Dato che operiamo nell'ambito di una teoria non relativistica e utilizziamo il concetto di potenziale, l'interazione è istantanea, quindi nei diagrammi di Goldstone le linee tratteggiate sono sempre orizzontali. Questo non è il caso dei diagrammi di Feynmann in cui l'interazione si propaga con velocità finita.

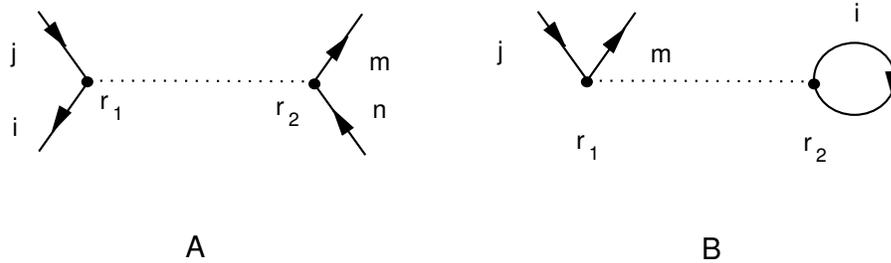


Figura 4.2:

Nella Figura (4.2 presento come esempio due diagrammi di cui scriverò l'espressione.

I diagrammi rappresentano valori di aspettazione del tipo:

$$\langle \Psi_a | V(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) | \Psi_b \rangle \quad (4.1)$$

in cui $|\Psi_a\rangle$ rappresenta lo stato iniziale e $|\Psi_b\rangle$ quello finale.

Considero il diagramma A della Figura 4.2. Lo stato iniziale è composto da uno stato particella n e uno stato buca i :

$$\langle \Psi_a | = \langle \Phi_0 | a_i^\dagger a_n \quad (4.2)$$

In questo caso anche lo stato finale è composto da stati buca e particella che, però sono differenti rispetto a quelli dello stato iniziale:

$$|\Psi_b\rangle = a_m^\dagger a_j | \Phi_0 \rangle. \quad (4.3)$$

L'espressione del diagramma rappresentato dal grafico A della Figura 4.2 è:

$$\langle \Phi_0 | a_i^+ a_n V a_m^+ a_j | \Phi_0 \rangle. \quad (4.4)$$

Ovviamente a questo punto bisogna inserire l'espressione dell'interazione V nella RNO:

$$V = \frac{1}{2} \sum_{\nu\nu'\mu\mu'} V_{\nu\mu\nu'\mu'} a_\nu^+ a_\mu^+ a_{\mu'} a_{\nu'}, \quad (4.5)$$

e quindi utilizzare il teorema di Wick per calcolare il valore di aspettazione.

La valutazione del termine B della figura 4.2 procede in maniera analoga. La differenza qui consiste nel fatto che gli stati buco dello stato iniziale e finale coincidono. L'espressione del diagramma è:

$$\langle \Phi_0 | a_i^+ a_n V a_m^+ a_j | \Phi_0 \rangle. \quad (4.6)$$

4.2 Teorema di Goldstone

Il teorema di Goldstone afferma che la differenza tra l'energia di un sistema di particelle interagenti e quella di un sistema di particelle non interagenti, può essere espressa come:

$$E_0 - \tilde{E}_0 = \langle \Phi_0 | H_1 \sum_{n=0}^{\infty} \left(\frac{1}{\tilde{E}_0 - H_0} H_1 \right)^n | \Phi_0 \rangle_c \quad (4.7)$$

dove H_0 e H_1 sono operatori indipendenti dal tempo nella rappresentazione di Schrödinger. Il significato del pedice c sarà chiarito più avanti.

Esplicitiamo l'eq. (4.7) per i primi termini di n

$$\begin{aligned} E_0 - \tilde{E}_0 &= \langle \Phi_0 | H_1 | \Phi_0 \rangle \\ &+ \langle \Phi_0 | H_1 \frac{1}{\tilde{E}_0 - H_0} H_1 | \Phi_0 \rangle \\ &+ \langle \Phi_0 | H_1 \frac{1}{\tilde{E}_0 - H_0} H_1 \frac{1}{\tilde{E}_0 - H_0} H_1 | \Phi_0 \rangle \\ &+ \dots \end{aligned} \quad (4.8)$$

Alcuni dei diagrammi prodotti dallo sviluppo sono presentati nella figura 4.3. Il diagramma A è contenuto nel primo termine dell'eq. (4.8). Una sola linea tratteggiata indica la presenza di una sola interazione H_1 . Non ci sono linee di particella o buca aperte perché il valore di aspettazione viene valutato sullo stato fondamentale di campo medio. L'altro diagramma presente nel primo termine è il cosiddetto termine di scambio, in cui le linee particella e buca sono scambiate tra i vari punti (è il diagramma B della figura 4.4).

Ovviamente il diagramma B della figura 4.3 è uno dei diagrammi del secondo termine dell'eq. (4.8) dato che contiene due linee di interazione H_1 . Anche qui bisogna aggiungere il termine di scambio.

Questi diagrammi mostrano che H_1 crea uno stato intermedio caratterizzato da 2 stati particella e 2 stati buca ($2p - 2h$), questo perché è un operatore a due corpi. Questo stato intermedio si propaga nel tempo ($(\tilde{E}_0 - H_0)^{-1}$ indica il propagatore) e poi viene de-eccitato dall'azione di un altro termine H_1 .

L'espressione tradizionale dello sviluppo perturbativo, può essere ottenuta inserendo una completezza di autostati di H_0 , $I = \sum_{n \neq 0} |\Phi_n\rangle\langle\Phi_n|$, (ho indicato con I l'operatore identità):

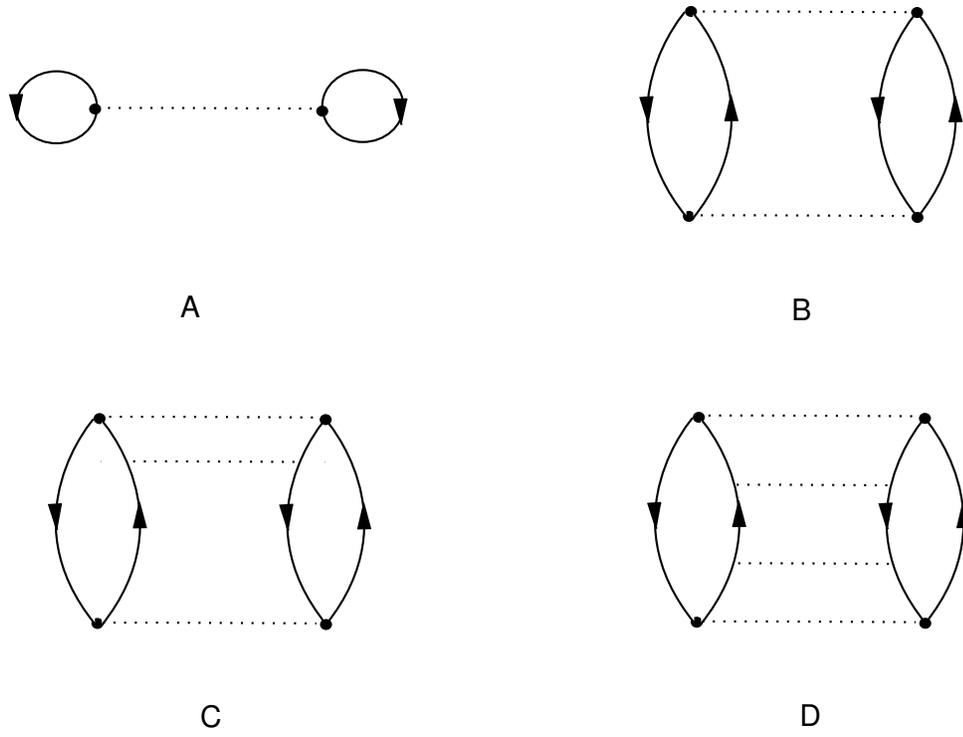


Figura 4.3:

$$E_0 - \tilde{E}_0 = \langle \Phi_0 | H_1 | \Phi_0 \rangle + \sum_{n \neq 0} \frac{\langle \Phi_0 | H_1 | \Phi_n \rangle \langle \Phi_n | H_1 | \Phi_0 \rangle}{\tilde{E}_0 - \tilde{E}_n} + \dots \quad (4.9)$$

Nel seguito darò l'indicazione di come si procede nella prova dell'eq. (4.7) partendo dall'espressione data dal teorema di Gell-Mann e Low. L'eq. (3.59) può essere riscritta come:

$$E_0 - \tilde{E}_0 = \frac{\langle \Phi_0 | H_1 | \Psi_0 \rangle}{\langle \Phi_0 | \Psi_0 \rangle} = \frac{\langle \Phi_0 | H_1 U(0, -\infty) | \Phi_0 \rangle}{\langle \Phi_0 | U(0, -\infty) | \Phi_0 \rangle} \quad (4.10)$$

Utilizzando l'espressione (3.33) dell'operatore di evoluzione temporale, si ottiene per il numeratore:

$$\begin{aligned} \langle \Phi_0 | H_1 U(0, -\infty) | \Phi_0 \rangle &= \sum_{\nu=0} \left(\frac{-i}{\hbar} \right)^\nu \frac{1}{\nu!} \int_{-\infty}^0 dt_1 \dots \int_{-\infty}^0 dt_\nu \\ &\quad \langle \Phi_0 | T[H_1, H_1(t_1) \dots, H_1(t_\nu)] | \Phi_0 \rangle \end{aligned} \quad (4.11)$$

dove abbiamo usato il $\lim \varepsilon \rightarrow 0$ di eq. (3.50). Il primo H_1 a sinistra è stato inserito al primo posto all'interno delle parentesi di T . Questa operazione non modifica il risultato, poiché questo H_1 è definito a $t = 0$ che è il tempo maggiore.

I vari termini dello sviluppo perturbativo possono essere calcolati utilizzando il teorema di Wick. L'analisi dei diagrammi che vengono generati in questo modo, indica la possibilità di suddividerli in due categorie: i diagrammi *connessi* e quelli *non connessi*. I diagrammi connessi sono quelli in cui esistono contrazioni tra gli operatori che definiscono $H_1(0)$ e gli altri operatori definiti a tempi precedenti.

Considero ad esempio il termine con $\nu = 1$:

$$\begin{aligned} \langle \Phi_0 | H_1(0) H_1(t_1) | \Phi_0 \rangle &= \\ \langle \Phi_0 | V_{\mu\nu\mu'\nu'} a_\mu^+(0) a_\nu^+(0) a_{\nu'}(0) a_{\mu'}(0) V_{\eta\xi\eta'\xi'} a_\eta^+(t_1) a_\xi^+(t_1) a_{\xi'}(t_1) a_{\eta'}(t_1) | \Phi_0 \rangle \end{aligned} \quad (4.12)$$

dove i termini di interazione sono stati esplicitati utilizzando gli operatori di campo.

Se non si effettuano contrazioni tra operatori definiti al tempo t_1 e operatori definiti al tempo $t = 0$, i due termini possono essere separati inserendo l'operatore identità $|\Phi_0\rangle\langle\Phi_0| = I$:

$$\langle \Phi_0 | V_{\mu\nu\mu'\nu'} a_\mu^+ a_\nu^+ a_{\nu'} a_{\mu'} | \Phi_0 \rangle_{t=0} \langle \Phi_0 | V_{\eta\xi\eta'\xi'} a_\eta^+ a_\xi^+ a_{\xi'} a_{\eta'} | \Phi_0 \rangle_{t=t_1} \quad (4.13)$$

Le contrazioni non nulle in questi due termini sono:

$$\overbrace{a_\mu^+(t) a_\nu^+(t) a_{\nu'}(t) a_{\mu'}(t)} \quad (4.14)$$

e

$$\overbrace{a_\mu^+(t) a_\nu^+(t) a_{\nu'}(t) a_{\mu'}(t)} \quad (4.15)$$

dove ho indicato con α e β gli operatori a cui la contrazione viene applicata. Il primo di questi termini è raffigurato dal diagramma A della figura 4.4 e il secondo dal diagramma B della stessa figura.

Il termine di eq. (4.13) produce quattro diagrammi, ognuno di questi ottenuto accoppiando due dei diagrammi di figura 4.4: uno al tempo $t = 0$ e l'altro al tempo $t = t_1$. Chiaramente questi sono diagrammi *non connessi*.

Se invece, applicando il teorema di Wick, si opera con delle contrazioni che collegano gli operatori definiti a $t = 0$ con quelli definiti a $t = t_1$, si hanno diagrammi connessi. Ad esempio:

$$\langle \Phi_0 | V_{\mu\nu\mu'\nu'} a_\mu^+(0) a_\nu^+(0) a_{\nu'}(0) a_{\mu'}(0) V_{\eta\xi\eta'\xi'} a_\eta^+(t) a_\xi^+(t) a_{\xi'}(t) a_{\eta'}(t) | \Phi_0 \rangle. \quad (4.16)$$

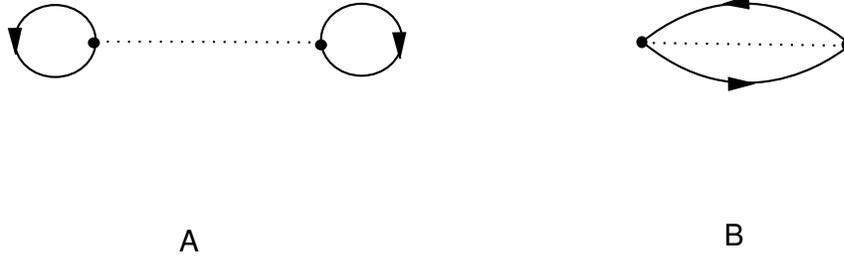


Figura 4.4:

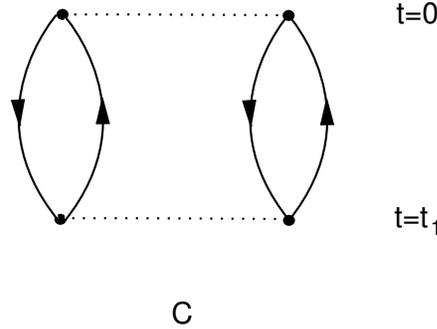


Figura 4.5:

In questo caso le lettere α , β , γ e δ indicano le coppie di operatori a cui la contrazione viene applicata. Il diagramma che rappresenta questo termine è mostrato in figura 4.5.

Il termine con $\nu = 1$, eq. (4.12), produce quindi diagrammi non connessi, come il diagramma A in Figura 4.6, e diagrammi connessi, come il diagramma di B della stessa Figura.

Dopo questa discussione sulla struttura dei vari termini dello sviluppo presenterò la prova dell'eq. (4.7).

Considero un termine dell'eq. (4.11) e ipotizzo che sia composto da due parti non connesse, come ad esempio il diagramma mostrato nella figura 4.7:

Il contributo di un diagramma di questo tipo è:

$$\begin{aligned} \langle \Phi_0 | H_1 U(0, -\infty) | \Phi_0 \rangle_\nu &= \\ \left(\frac{-i}{\hbar} \right)^\nu \frac{1}{\nu!} \int_{-\infty}^0 dt_1 \dots \int_{-\infty}^0 dt_n &\langle \Phi_0 | T[H_1(0) \dots H_1(t_n)] | \Phi_0 \rangle_c \\ \int_{-\infty}^0 dt_{n+1} \dots \int_{-\infty}^0 dt_{n+m} &\langle \Phi_0 | T[H_1(t_{n+1}) \dots H_1(t_{n+m})] | \Phi_0 \rangle_c \end{aligned} \quad (4.17)$$

Ho separato le due parti connesse, la prima contenente n interazioni H_1 e la seconda con m interazioni.

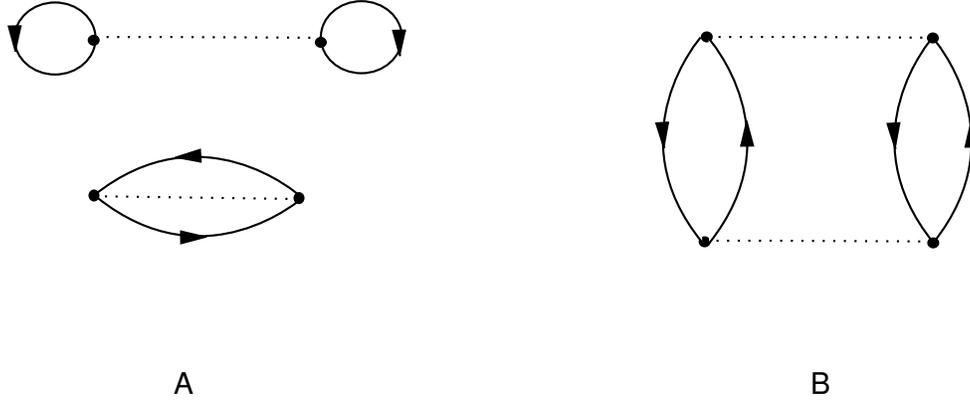


Figura 4.6:

Valuto il contributo totale dei diagrammi di ordine ν che possono essere suddivisi in due parti, di ordine n e m ($\nu = m + n$).

Diagrammi di questo tipo possono essere ottenuti scambiando tra loro gli operatori H_1 . È da notare che scambiando tra loro due operatori H_1 definiti a tempi differenti si scambiano 4 operatori di creazione e distruzione, quindi la fase totale generata dallo scambio è sempre positiva. Il numero delle possibili permutazioni è $\nu!$. D'altra parte lo scambio di due operatori H_1 appartenenti alla stessa partizione non produce un nuovo diagramma. Il numero delle permutazioni che non generano nessun nuovo diagramma è $n!m!$.

Il contributo totale dei diagrammi del tipo di quello di Figura 4.7 all'eq. (4.11) è dato da :

$$\sum_n \sum_m \left(\frac{-i}{\hbar}\right)^{n+m} \frac{\nu!}{n!m!} \frac{1}{\nu!} \int_{-\infty}^0 dt_1 \dots \int_{-\infty}^0 dt_n \langle \Phi_0 | T[H_1, H_1(t_1) \dots H_n(t_n)] | \Phi_0 \rangle_c \int_{-\infty}^0 dt_{n+1} \dots \int_{-\infty}^0 dt_{n+m} \langle \Phi_0 | T[H_1(t_{n+1}) \dots H_1(t_{n+m})] | \Phi_0 \rangle_c \quad (4.18)$$

Il secondo termine è presente nel denominatore di eq. (4.10). In questo secondo termine, sotto il simbolo dell'operatore di ordinamento temporale T non c'è $H_1(0)$ che è l'unico elemento estraneo al denominatore di eq. (4.10). Tutti i diagrammi non collegati con $H_1(0)$, diagrammi che abbiamo definito come non connessi, sono eliminati dal denominatore.

Dopo aver chiarito perché nell'espressione del teorema di Goldstone appaiono soltanto diagrammi connessi, non resta che calcolare gli integrali sul tempo.

Considero l'ordine n e uso l'espressione esplicita dell'operatore H_1 in rappresentazione di interazione:

$$H_1(t) = e^{i\frac{H_0 t}{\hbar}} H_1 e^{-i\frac{H_0 t}{\hbar}}. \quad (4.19)$$

Il termine di ordine n può essere scritto come:

$$[E_0 - \tilde{E}_0]_n = \left(\frac{-i}{\hbar}\right)^n \int_{-\infty}^0 dt_1 \dots \int_{-\infty}^{t_1} dt_2 \dots \int_{-\infty}^{t_{n-1}} dt_n e^{\epsilon(t_1 + \dots + t_n)} \langle \Phi_0 | H_1 e^{i\frac{H_0 t_1}{\hbar}} H_1 e^{-i\frac{H_0 t_2}{\hbar}} H_1 \dots e^{-i\frac{H_0 t_{n-1}}{\hbar}} e^{i\frac{H_0 t_n}{\hbar}} H_1 e^{-i\frac{H_0 t_n}{\hbar}} | \Phi_0 \rangle_c$$

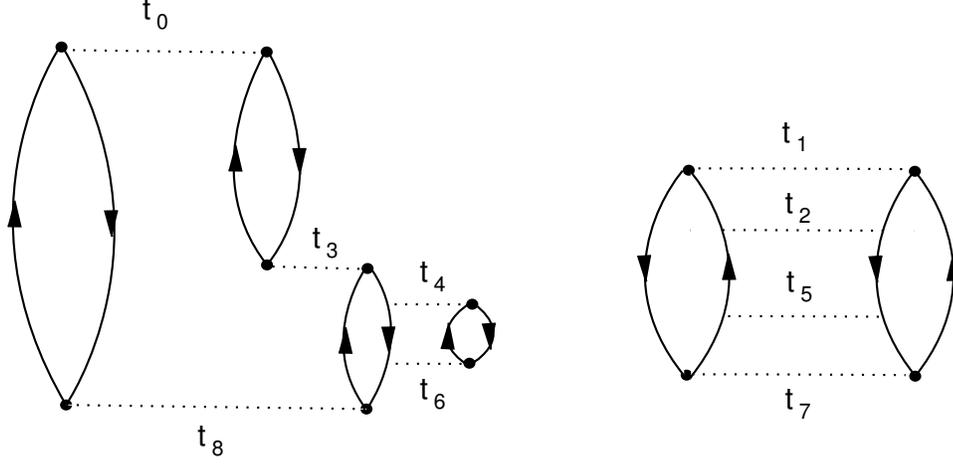


Figura 4.7:

dove ho eliminato T scrivendo esplicitamente i limiti di integrazione e ho inserito il fattore $e^{\epsilon t}$. Faccio un cambio delle variabili di integrazione:

$$\begin{aligned} x_1 = t_1 \quad , \quad x_2 = t_2 - t_1 \quad , \quad x_3 = t_3 - t_2 \quad , \quad \dots \quad , \quad x_n = t_n - t_{n-1} \\ t_1 = x_1 \quad , \quad t_2 = x_2 + x_1 \quad , \quad t_3 = x_3 + x_2 + x_1 \quad , \quad \dots \quad , \quad t_n = \sum_n x_n \end{aligned}$$

e usando $H_0|\Phi_0\rangle = \tilde{E}_0|\Phi_0\rangle$ ottengo:

$$\begin{aligned} [E_0 - \tilde{E}_0]_n &= \left(\frac{-i}{\hbar}\right)^n \langle \Phi_0 | \int_{-\infty}^0 dx_1 \int_{-\infty}^0 dx_2 \dots \int_{-\infty}^0 dx_n \\ &e^{\epsilon(x_1 + (x_2 + x_1) + (x_3 + x_2 + x_1) + \dots + (x_n + x_{n-1} + \dots + x_2 + x_1))} \\ &H_1 e^{i\frac{H_0 x_1}{\hbar}} H_1 e^{i\frac{H_0 x_2}{\hbar}} H_1 \dots e^{i\frac{H_0 x_n}{\hbar}} H_1 e^{-i\frac{H_0 t_n}{\hbar}} |\Phi_0\rangle_c \end{aligned}$$

Considero il termine a destra dell'equazione precedente,

$$e^{-i\frac{H_0 t_n}{\hbar}} |\Phi_0\rangle = e^{-i\frac{\tilde{E}_0}{\hbar} t_n} |\Phi_0\rangle = e^{-i\frac{\tilde{E}_0}{\hbar} (x_1 + \dots + x_n)} |\Phi_0\rangle_c \quad (4.20)$$

che inserito nell'integrale permette di scrivere:

$$\begin{aligned} [E_0 - \tilde{E}_0]_n &= \left(\frac{-i}{\hbar}\right)^n \langle \Phi_0 | H_1 \int_{-\infty}^0 dx_1 e^{n\epsilon x_1} e^{i\frac{(H_0 - \tilde{E}_0)}{\hbar} x_1} \cdot H_1 \\ &\int_{-\infty}^0 dx_2 e^{(n-1)\epsilon x_2} e^{i\frac{(H_0 - \tilde{E}_0)}{\hbar} x_2} \cdot H_1 \dots \int_{-\infty}^0 e^{\epsilon x_n} e^{i\frac{(H_0 - \tilde{E}_0)}{\hbar} x_n} H_1 |\Phi_0\rangle_c \end{aligned}$$

Abbiamo espresso il termine n -esimo come prodotto di n integrali del tipo:

$$\int_{-\infty}^0 dx_1 e^{\frac{i}{\hbar}(H_0 - \tilde{E}_0 - i n \epsilon \hbar) x_1} = \frac{\hbar}{-i [\tilde{E}_0 - H_0 + i n \epsilon \hbar]} \quad (4.21)$$

Dato che ci sono n termini uguali, c'è un fattore $\left(\frac{\hbar}{-i}\right)^n$, che può essere fattorizzato, quindi:

$$[E - \tilde{E}_0]_n = \langle \Phi_0 | H_1 \frac{1}{\tilde{E}_0 - H_0 + i\epsilon\hbar} H_1 \frac{1}{\tilde{E}_0 - H_0 + i\epsilon(n-1)\hbar} \dots H_1 \frac{1}{\tilde{E}_0 - H_0 + i\epsilon\hbar} H_1 | \Phi_0 \rangle_c \quad (4.22)$$

Facendo il $\lim \epsilon \rightarrow 0$ si prova il teorema. È da notare che il fatto che l'equazione sia valida per i soli diagrammi connessi impedisce di inserire $|\Phi_0\rangle$ questo motivo non sono presenti divergenze dato che il denominatore $\tilde{E}_0 - H_0$ è sempre diverso da zero.

Capitolo 5

Teoria di Brueckner

5.1 Introduzione

Il calcolo dell'energia dello stato fondamentale del sistema interagente è basato sull'equazione di Goldstone che riscrivo per comodità

$$E_0 - \tilde{E}_0 = \langle \Phi_0 | H_1 \sum_n \left(\frac{1}{\tilde{E}_0 - H_0} H_1 \right)^n | \Phi_0 \rangle_c, \quad (5.1)$$

dove E_0 è l'energia del sistema interagente, \tilde{E}_0 è il minimo autovalore di H_0 , ed il sub-indice c indica che solo i diagrammi connessi sono da considerare nello sviluppo. Quest'ultimo criterio evita le divergenze prodotte da eventuali zeri del denominatore.

Lo schema di calcolo è, in principio, ben definito. Si ottiene l'interazione V , contenuta in H_1 , dallo studio dei sistemi a due corpi, nucleone-nucleone, atomo-atomo, molecola-molecola, poi si inserisce nello sviluppo di Goldstone (5.1) per ottenere il valore dell'energia dello stato fondamentale del sistema. Il problema è che l'interazione microscopica tra due fermioni diverge per piccoli valori della distanza relativa. Questa è un'evidenza empirica osservata per i sistemi a molti corpi più diversi, dalla materia nucleare all'elio liquido. Lo stesso problema è presente anche nel gas di elettroni dove l'interazione colombiana presenta una divergenza per distanze relative nulle. Il problema legato alla divergenza, o forte repulsione, per piccole distanze, è schematicamente illustrato nella figura 5.1 dove ho indicato con ψ la funzione d'onda che descrive il moto relativo dei due fermioni che interagiscono con il potenziale $V(r)$. Il prodotto $V(r) \psi(r)$ è sempre finito per ogni valore di r . A piccole distanze, dove il potenziale diventa molto grande, la funzione d'onda $\psi(r)$ risulta essere molto piccola. Nel limite di un potenziale che tende all'infinito, la funzione d'onda tende a zero più velocemente di quanto il potenziale diverga, in modo tale che il prodotto $V(r) \psi(r)$ risulti sempre finito. Questo non avviene se si moltiplica il potenziale per la funzione d'onda relativa ϕ di due particelle libere, ovvero descritte dall'hamiltoniana H_0 .

Nell'equazione si calcolano elementi di matrice dell'interazione tra stati imperturbati $|\Phi_0\rangle$. Il problema che sorge diventa evidente se si suppone che $V(r)$ tenda all'infinito per piccole distanze di interazione. Ogni termine dello sviluppo sarebbe infinito, e si cercherebbe di ottenere un valore finito, sommando e sottraendo termini infiniti. Anche ipotizzando l'uso di potenziali con un core fortemente repulsivo ma non infinito, il problema rimane. Ogni termine dello sviluppo sarebbe molto più grande del valore dell'energia che si vuole ottenere. Questo è proprio l'opposto del concetto di perturbazione. Evidentemente, *i potenziali microscopici non sono perturbativi*, e quindi da non usare direttamente nello sviluppo di Goldstone.

L'idea della teoria di Brueckner è quella di utilizzare nello sviluppo di Goldstone (5.1) una interazione effettiva che si comporti bene a piccole distanze, in modo da essere perturbativa. Questo implica la

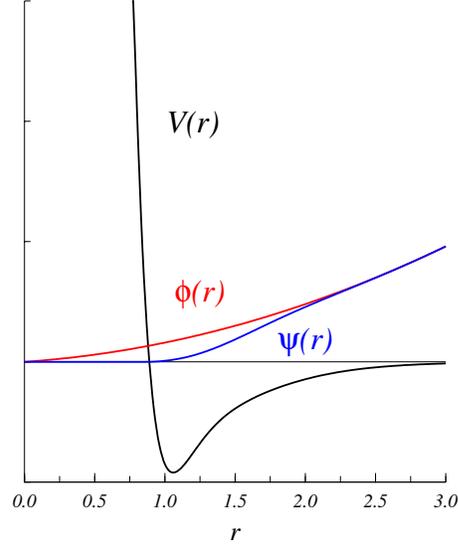


Figura 5.1: Potenziale microscopico tra due fermioni e funzioni d'onda relative. Con ψ indichiamo quella dei due fermioni interagenti e con ϕ quella dei due fermioni non interagenti.

definizione di una nuova interazione \mathcal{G} tale che

$$\mathcal{G}|\Phi_0\rangle = V|\Psi_0\rangle \quad (5.2)$$

dove

$$H_0|\Phi_0\rangle = \tilde{E}_0|\Phi_0\rangle \quad (5.3)$$

e

$$H|\Psi_0\rangle = (H_0 + H_1)|\Psi_0\rangle = (H_0 + V)|\Psi_0\rangle = E_0|\Psi_0\rangle \quad (5.4)$$

5.2 La somma dei diagrammi a scala (ladder diagrams)

In questa sezione presenterò l'idea di base di come viene costruita l'interazione \mathcal{G} . Consideriamo un'hamiltoniana contenente soltanto interazioni a due corpi.

$$H = \sum_i t_i + \sum_{i<j} v_{ij} = \sum_i (t_i + u_i) + \sum_{i<j} v_{ij} - \sum_i u_i \quad (5.5)$$

dove il termine di potenziale a campo medio u_i è stato aggiunto e tolto. Definiamo

$$H_0|\Phi_0\rangle = (T + U)|\Phi_0\rangle = \sum_i (t_i + u_i)|\Phi_0\rangle = \sum_i h_i|\Phi_0\rangle \quad (5.6)$$

dove Φ_0 è il determinante di Slater

$$\Phi_0(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_A) = \frac{1}{\sqrt{A!}} \det |\phi_1(\mathbf{r}_1)\phi_2(\mathbf{r}_2)\dots\phi_A(\mathbf{r}_A)| \quad (5.7)$$

e le funzioni di singola particella sono definite come

$$h_i|\phi_i\rangle = \epsilon_i|\phi_i\rangle \quad (5.8)$$

e

$$\tilde{E}_0 = \sum_i \epsilon_i \quad (5.9)$$

Nella rappresentazione dei numeri di occupazione si ha che

$$H_0 = \sum_\nu (\langle\nu|t|\nu\rangle + \langle\nu|u|\nu\rangle) a_\nu^\dagger a_\nu \quad (5.10)$$

$$H_1 = \frac{1}{2} \sum_{\nu\nu'\mu\mu'} \langle\nu\mu|v|\nu'\mu'\rangle a_\nu^\dagger a_\mu^\dagger a_{\mu'} a_{\nu'} - \sum_\nu \langle\nu|u|\nu\rangle a_\nu^\dagger a_\nu \quad (5.11)$$

Per definizione abbiamo che

$$\tilde{E}_0 = \langle\Phi_0|H_0|\Phi_0\rangle = \langle\Phi_0|T|\Phi_0\rangle + \langle\Phi_0|U|\Phi_0\rangle \quad (5.12)$$

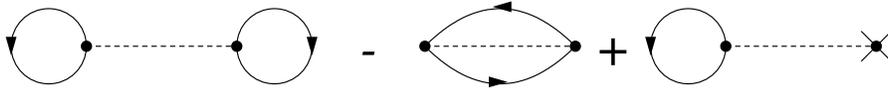


Figura 5.2: Diagrammi corrispondenti al termine (5.13).

Il primo termine dello sviluppo (5.1) è $n = 0$

$$\begin{aligned} (E_0 - \tilde{E}_0)_{(n=0)} &= \langle\Phi_0|H_1|\Phi_0\rangle = \langle\Phi_0|V - U|\Phi_0\rangle \\ &= \frac{1}{2} \sum_{\nu\nu'\mu\mu'} \langle\nu\mu|v|\nu'\mu'\rangle \langle\Phi_0|a_\nu^\dagger a_\mu^\dagger a_{\mu'} a_{\nu'}|\Phi_0\rangle - \sum_\nu \langle\nu|u|\nu\rangle \langle\Phi_0|a_\nu^\dagger a_\nu|\Phi_0\rangle \\ &= \frac{1}{2} \sum_{ij} (\langle ij|v|ij\rangle - \langle ij|v|ji\rangle) - \sum_i \langle i|u|i\rangle \end{aligned} \quad (5.13)$$

I diagrammi corrispondenti sono presentati nella figura 5.2. Come è stato fatto nei capitoli precedenti ho usato le lettere i, j, k, l per stati di singola particella tipo buca, sotto la superficie di Fermi, e le lettere m, n, p, q, r , per stati particella, sopra la superficie di Fermi.

Consideriamo ora il termine $n = 1$.

$$\begin{aligned} (E_0 - \tilde{E}_0)_{(n=1)} &= \langle\Phi_0|H_1(\tilde{E}_0 - H_0)^{-1}H_1|\Phi_0\rangle_c \\ &= \langle\Phi_0|V(\tilde{E}_0 - H_0)^{-1}V|\Phi_0\rangle_c - \langle\Phi_0|U(\tilde{E}_0 - H_0)^{-1}V|\Phi_0\rangle_c \\ &\quad - \langle\Phi_0|V(\tilde{E}_0 - H_0)^{-1}U|\Phi_0\rangle_c + \langle\Phi_0|U(\tilde{E}_0 - H_0)^{-1}U|\Phi_0\rangle_c \end{aligned} \quad (5.14)$$

Consideriamo il primo termine

$$\begin{aligned} &\langle\Phi_0|V(\tilde{E}_0 - H_0)^{-1}V|\Phi_0\rangle_c \\ &= \frac{1}{4} \langle\Phi_0| \sum_{\nu\nu'\mu\mu'} \langle\nu\mu|v|\nu'\mu'\rangle a_\nu^\dagger a_\mu^\dagger a_{\mu'} a_{\nu'} (\tilde{E}_0 - H_0)^{-1} \sum_{\alpha\beta\alpha'\beta'} \langle\alpha\beta|v|\alpha'\beta'\rangle a_\alpha^\dagger a_\beta^\dagger a_{\beta'} a_{\alpha'} |\Phi_0\rangle_c \end{aligned} \quad (5.15)$$

Possiamo inserire a destra e a sinistra del denominatore $(E_0 - H_0)^{-1}$ un proiettore $|\Phi_n\rangle\langle\Phi_n| = I$ purché $n \neq 0$, altrimenti si produrrebbero diagrammi non connessi, contraddicendo la limitazione imposta dal sub-indice c , e provocando divergenze. Questi determinanti di Slater $|\Phi_n\rangle$ rappresentano stati eccitati del sistema imperturbato formati dall'eccitazione 2 particelle - 2 buche (2p-2h), la cui energia è data da

$$\tilde{E}_0 + \epsilon_m + \epsilon_n - \epsilon_i - \epsilon_j \quad (5.16)$$

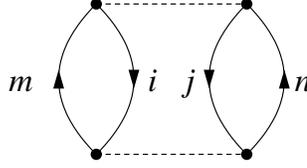


Figura 5.3: Diagrammi corrispondenti al termine (5.17).

Dato che $|\Phi_n\rangle$ è autostato di H_0 , il denominatore della (5.17) è diagonale rispetto a questi stati, quindi bisogna inserire lo stesso proiettore a destra e a sinistra del denominatore, per questo motivo le linee delle particelle e buche create dall'interazione a sinistra, si collegano con quelle distrutte dall'interazione di destra. Il diagramma diretto corrispondente a questo termine è presentato nella figura 5.3. Il contributo di questo diagramma è

$$\begin{aligned} \langle\Phi_0|V(\tilde{E}_0 - H_0)^{-1}V|\Phi_0\rangle_c &= \frac{1}{4} \sum_{ijmn} \left(\langle ij|v|mn\rangle (\tilde{E}_0 - (\tilde{E}_0 + \epsilon_m + \epsilon_n - \epsilon_i - \epsilon_j))^{-1} \langle mn|v|ij\rangle \right) \\ &= \sum_{ijmn} \left(\langle ij|v|mn\rangle (\epsilon_i + \epsilon_j - \epsilon_m - \epsilon_n)^{-1} \langle mn|v|ij\rangle \right) \end{aligned} \quad (5.17)$$

In maniera analoga, si possono calcolare gli altri termini, ad esempio

$$\langle\Phi_0|V(\tilde{E}_0 - H_0)^{-1}U|\Phi_0\rangle_c = \sum_{ijm} \left(\langle ij|v|mj\rangle (\epsilon_i - \epsilon_m)^{-1} \langle m|u|i\rangle \right) \quad (5.18)$$

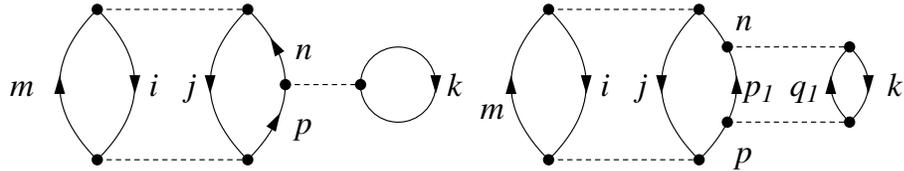


Figura 5.4: Inserimento di interazioni nella linea di particella.

Consideriamo adesso un diagramma particolare ed una interazione che operi tra linee di particella, e aggiungiamo altre interazioni. La scelta di operare solo su linee di particella è dovuta al fatto che

l'interazione cambia ϕ_α , ed operando su linee particella non c'è alcun impedimento legato al principio di esclusione di Pauli.

Consideriamo il grafico della figura 5.4, ed inseriamo linee di interazione nella parte della linea p e n . Il diagramma con una sola linea di interazione tra p e n è dato da

$$\begin{aligned} & \langle \Phi_0 | V (\tilde{E}_0 - H_0)^{-1} V (\tilde{E}_0 - H_0)^{-1} V | \Phi_0 \rangle_c \\ &= \sum_{ijmp} \langle ij | v | mp \rangle (\epsilon_i + \epsilon_j - \epsilon_m - \epsilon_p)^{-1} \sum_k [\langle pk | v | nk \rangle] (\epsilon_i + \epsilon_j - \epsilon_m - \epsilon_n)^{-1} \langle mn | v | ij \rangle \end{aligned} \quad (5.19)$$

Il diagramma con due linee di interazione tra p e n è dato da

$$\begin{aligned} & \langle \Phi_0 | V (\tilde{E}_0 - H_0)^{-1} V (\tilde{E}_0 - H_0)^{-1} V (\tilde{E}_0 - H_0)^{-1} V | \Phi_0 \rangle_c \\ &= \sum_{ijmp} \langle ij | v | mp \rangle (\epsilon_i + \epsilon_j - \epsilon_m - \epsilon_p)^{-1} \\ & \quad \sum_k \left[\sum_{p_1 q_1} \langle pk | v | p_1 q_1 \rangle (\epsilon_i + \epsilon_j + \epsilon_k - \epsilon_m - \epsilon_{p_1} - \epsilon_{q_1})^{-1} \langle p_1 q_1 | v | nk \rangle \right] \\ & \quad (\epsilon_i + \epsilon_j - \epsilon_m - \epsilon_n)^{-1} \langle mn | v | ij \rangle \end{aligned} \quad (5.20)$$

Si vede che c'è una parte costante del contributo generata dai termini del diagramma che non vengono modificati. Questi sono il primo e l'ultimo termine della (5.20) che rappresentano i tempi iniziali e quelli finali. La parte che viene continuamente modificata si trova tra parentesi quadre. Anche in questo fattore, nel denominatore c'è un parte, costante, che rappresenta le differenze tra le energie delle parti del diagramma non modificate. Definiamo

$$W = \epsilon_i + \epsilon_j + \epsilon_k - \epsilon_m \quad (5.21)$$

In sintesi i termini che vengono modificati inserendo linee di interazione sono

$$1 \text{ linea} \quad \langle pk | v | nk \rangle \quad (5.22)$$

$$2 \text{ linee} \quad \sum_{p' q'} \langle pk | v | p_1 q_1 \rangle (W - \epsilon_{p_1} - \epsilon_{q_1})^{-1} \langle p_1 q_1 | v | nk \rangle \quad (5.23)$$

$$3 \text{ linee} \quad \sum_{p_1 q_1 p_2 q_2} \langle pk | v | p_1 q_1 \rangle (W - \epsilon_{p_1} - \epsilon_{q_1})^{-1} \langle p_1 q_1 | v | p_2 q_2 \rangle (W - \epsilon_{p_2} - \epsilon_{q_2})^{-1} \langle p_2 q_2 | v | nk \rangle \quad (5.24)$$

$$n \text{ linee} \quad \dots$$

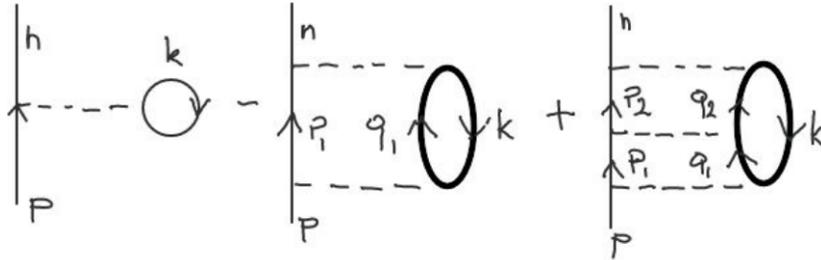


Figura 5.5: Inserimento di interazioni nella linea di particella.

Possiamo costruire un operatore \mathcal{G} che opera inserendo tutte le linee di interazione tra gli stati $\langle pk|$ e $|nk\rangle$. A questo scopo definiamo un operatore tale che

$$Q|\alpha\beta\rangle = |\alpha\beta\rangle \text{ (se } \epsilon_\alpha, \epsilon_\beta > \epsilon_F) \quad (5.25)$$

$$Q|\alpha\beta\rangle = 0 \text{ (se } \epsilon_\alpha, \epsilon_\beta < \epsilon_F) \quad (5.26)$$

e un operatore

$$\mathcal{E}|pq\rangle = (W - \epsilon_p - \epsilon_q)|pq\rangle \quad (5.27)$$

Quindi

$$\begin{aligned} \langle pk|\mathcal{G}|nk\rangle &= \langle pk|v|nk\rangle \\ &+ \sum_{p_1 q_1} \langle pk|v|p_1 q_1\rangle (W - \epsilon_{p_1} - \epsilon_{q_1})^{-1} \langle p_1 q_1|v|nk\rangle \\ &+ \sum_{p_1 q_1 p_2 q_2} \langle pk|v|p_2 q_2\rangle (W - \epsilon_{p_2} - \epsilon_{q_2})^{-1} \langle p_2 q_2|v|p_1 q_1\rangle (W - \epsilon_{p_1} - \epsilon_{q_1})^{-1} \langle p_1 q_1|v|nk\rangle \\ &+ \dots \\ &= \langle pk|v + v \frac{Q}{\mathcal{E}} v + v \frac{Q}{\mathcal{E}} v \frac{Q}{\mathcal{E}} v + \dots |nk\rangle \\ &= \langle pk|v + v \frac{Q}{\mathcal{E}} \mathcal{G}|nk\rangle \end{aligned} \quad (5.28)$$

Dal punto di vista operatoriale abbiamo un'equazione integrale, detta di Bethe-Goldstone

$$\mathcal{G} = v + v \frac{Q}{\mathcal{E}} \mathcal{G} \quad (5.29)$$

L'idea è quella di utilizzare nello sviluppo di Goldstone (5.1) l'interazione \mathcal{G} al posto di V . A questo scopo bisogna evitare la possibilità di doppio conteggio. Ad esempio nel diagramma di figura 5.6 le due linee superiori rappresentano un doppio conteggio.

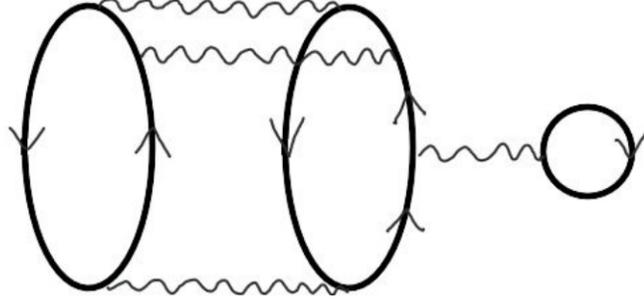


Figura 5.6: Diagramma che presenta un doppio conteggio.

5.3 L'equazione di Bethe-Goldstone

Otteniamo l'equazione di Bethe-Goldstone partendo dalla definizione (5.2). Utilizziamo le seguenti definizioni

$$H_0|\Phi_n\rangle = \tilde{E}_n|\Phi_n\rangle \quad (5.30)$$

$$H|\Psi_n\rangle = (H_0 + H_1)|\Psi_n\rangle = E_n|\Psi_n\rangle \quad (5.31)$$

Dato che gli autostati della (5.30) formano una base completa, si può, a meno di una normalizzazione globale, sviluppare la $|\Psi_0\rangle$ su questa base

$$|\Psi_0\rangle = |\Phi_0\rangle + \sum_{n \neq 0} a_n |\Phi_n\rangle \quad (5.32)$$

La (5.31) per lo stato fondamentale può essere riscritta come

$$(H_0 + H_1) \left(|\Phi_0\rangle + \sum_{n \neq 0} a_n |\Phi_n\rangle \right) = E_0 \left(|\Phi_0\rangle + \sum_{n \neq 0} a_n |\Phi_n\rangle \right) \quad (5.33)$$

$$(H_0 - E_0) \left(|\Phi_0\rangle + \sum_{n \neq 0} a_n |\Phi_n\rangle \right) + H_1 |\Psi_0\rangle = 0 \quad (5.34)$$

Moltiplicando a sinistra per $\langle \Phi_0 |$ e considerando l'ortogonalità delle $|\Phi_n\rangle$, abbiamo

$$\begin{aligned} \langle \Phi_0 | (H_0 - E_0) \left(|\Phi_0\rangle + \sum_{n \neq 0} a_n |\Phi_n\rangle \right) + \langle \Phi_0 | H_1 |\Psi_0\rangle &= 0 \\ \tilde{E}_0 - E_0 + \langle \Phi_0 | H_1 |\Psi_0\rangle &= 0 \end{aligned} \quad (5.35)$$

Moltiplicando per $\langle \Phi_n |$ la (5.34), con $n > 0$, si ha

$$\langle \Phi_n | \left((H_0 - E_0) \left(|\Phi_0\rangle + \sum_{n' \neq 0} a_{n'} |\Phi_{n'}\rangle \right) \right) + \langle \Phi_n | H_1 |\Psi_0\rangle = 0 \quad (5.36)$$

e, dato che $\langle \Phi_n | \Phi_{n'} \rangle = \delta_{n,n'}$

$$(\tilde{E}_n - E_0) a_n + \langle \Phi_n | H_1 |\Psi_0\rangle = 0 \quad (5.37)$$

Utilizzando l'espressione degli a_n estratta dall'equazione precedente, ed inserendola nella (5.32) otteniamo

$$\begin{aligned} |\Psi_0\rangle &= |\Phi_0\rangle + \sum_{n \neq 0} \frac{1}{E_0 - \tilde{E}_n} |\Phi_n\rangle \langle \Phi_n | H_1 |\Psi_0\rangle \\ &= |\Phi_0\rangle + Q \frac{1}{E_0 - H_0} H_1 |\Psi_0\rangle \end{aligned} \quad (5.38)$$

dove ho definito Q come

$$Q = \sum_{n \neq 0} |\Phi_n\rangle \langle \Phi_n | . \quad (5.39)$$

Moltiplicando a sinistra per H_1

$$H_1 |\Psi_0\rangle = H_1 |\Phi_0\rangle + H_1 \frac{Q}{E_0 - H_0} H_1 |\Psi_0\rangle \quad (5.40)$$

e considerando la definizione (5.2) dell'operatore \mathcal{G} , $H_1 |\Psi_0\rangle = \mathcal{G} |\Phi_0\rangle$

$$\mathcal{G} |\Phi_0\rangle = H_1 |\Phi_0\rangle + H_1 \frac{Q}{E_0 - H_0} \mathcal{G} |\Phi_0\rangle = \left(H_1 + H_1 \frac{Q}{E_0 - H_0} \mathcal{G} \right) |\Phi_0\rangle \quad (5.41)$$

che è l'equazione di Bethe-Goldstone (5.29) ottenuta inserendo infiniti termini a scala dell'interazione nella linea di particella.

5.4 Il confronto con l'equazione di Lipmann-Schwinger

Consideriamo due particelle che diffondono nel vuoto. Il comportamento asintotico della funzione d'onda del moto relativo può essere espresso come

$$\lim_{r \rightarrow \infty} \psi_{k_a}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}_a \cdot \mathbf{r}} + f_{k_a}(\Omega) \frac{e^{k_a r}}{r} \quad (5.42)$$

La sezione d'urto è legata all'ampiezza di transizione dalla relazione

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f_{k_a}(\Omega)|^2 \quad (5.43)$$

per un'hamiltoniana $H = T + V$ si ha che [Mes61]

$$\langle \phi_b | V | \psi_a \rangle = -\frac{2\pi\hbar^2}{m} f_a(\Omega) \quad (5.44)$$

dove abbiamo semplificato la scrittura indicando $a = k_a$ e analogamente per b . L'equazione (5.44) non descrive un elemento di matrice perché gli stati del valore di aspettazione non sono autostati della stessa hamiltoniana. Con ϕ abbiamo indicato la funzione d'onda dell'hamiltoniana libera e con ψ quella dell'hamiltoniana totale.

Definiamo le funzioni di Green come risolventi dell'hamiltoniana libera e interagente. Per la funzione di Green libera abbiamo che

$$\frac{\hbar^2}{2m} [\nabla^2 + k^2] G^0(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \quad (5.45)$$

e

$$G^0(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \frac{e^{ik|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \quad (5.46)$$

dove l'energia della particella libera è

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \quad (5.47)$$

La soluzione dell'equazione di Schrödinger con potenziale è

$$\psi(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} + \int d^3 r' G^0(\mathbf{r}, \mathbf{r}') V(\mathbf{r}') \psi(\mathbf{r}') \quad (5.48)$$

infatti inserendola nell'equazione

$$\frac{\hbar^2}{2m} [\nabla^2 + k^2] \psi(\mathbf{r}) = V(\mathbf{r}) \psi(\mathbf{r}) \quad (5.49)$$

abbiamo

$$\begin{aligned} & \frac{\hbar^2}{2m} [\nabla^2 + k^2] e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} + \int d^3 r' \frac{\hbar^2}{2m} [\nabla^2 + k^2] G^0(\mathbf{r}, \mathbf{r}') V(\mathbf{r}') \psi(\mathbf{r}') \\ &= \frac{\hbar^2}{2m} [-k^2 + k^2] e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} + \int d^3 r' \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') V(\mathbf{r}') \psi(\mathbf{r}') \\ &= 0 + V(\mathbf{r}) \psi(\mathbf{r}) \end{aligned}$$

Definiamo un operatore \mathcal{T} tale che

$$\langle \phi_b | \mathcal{T} | \phi_a \rangle = \langle \phi_b | V | \psi_a \rangle \quad (5.50)$$

In termini operatoriali abbiamo che la (5.45) può essere riscritta come

$$(E - H_0)G^0 = 1 ; G^0 = (E - H_0)^{-1} \quad (5.51)$$

e la (5.48)

$$|\psi_a\rangle = |\phi_a\rangle + G^0 V |\psi_a\rangle = |\phi_a\rangle + \frac{1}{E - H_0 + i\eta} V |\psi_a\rangle \quad (5.52)$$

dove è stato inserito il termine $i\eta$ per evitare divergenze. Moltiplicando a sinistra per V e considerando la definizione di \mathcal{T} (5.50)

$$\begin{aligned} V|\psi_a\rangle &= V|\phi_a\rangle + V \frac{1}{E - H_0 + i\eta} V |\psi_a\rangle \\ \mathcal{T}|\phi_a\rangle &= \left(V + V \frac{1}{E - H_0 + i\eta} \mathcal{T} \right) |\phi_a\rangle \end{aligned} \quad (5.53)$$

che è l'equazione di Lipmann-Schwinger.

L'analogia con l'equazione di Bethe-Goldstone (5.41) è evidente. Anche l'equazione di Bethe-Goldstone descrive l'interazione tra due particelle che diffondono, ma nel mezzo. La differenza più notevole è legata alla presenza dell'operatore Q che considera il principio di esclusione di Pauli. Nel mezzo sono permesse solo le interazioni che popolano stati al di sopra il livello di Fermi, mentre nel vuoto tutti gli stati finali sono disponibili.

La seconda differenza è legata al denominatore di energia. Nell'equazione di Lipmann-Schwinger il denominatore è composto dalle energie cinetiche delle particelle che collidono, e la presenza del termine immaginario è necessario perché esiste la possibilità che il denominatore si annulli. Nella Bethe-Goldstone il denominatore non si annulla mai, perché non ci sono diagrammi non connessi. Inoltre, le energie di singola particella, non sono le energie cinetiche, ma contengono anche il termine di energia potenziale che le tiene legate al sistema. In aggiunta, esiste anche il termine W , definito dall'equazione (5.21) che inserisce una dipendenza del denominatore di energia anche dalle energie di singola particella dei termini del diagramma che non sono coinvolti direttamente dall'interazione delle due particelle considerate.

5.5 Applicazione alla materia nucleare

Le difficoltà di calcolo legate alle peculiarità di ogni nucleo hanno spinto ad applicare l'equazione di Bethe-Goldstone ad un sistema fittizio detto materia nucleare. Si tratta di un sistema infinito di nucleoni, quindi con invarianza traslazionale, nel quale l'interazione di Coulomb viene spenta. Nel caso specifico ci limiteremo a considerare materia nucleare simmetrica che ha un egual numero di protoni e di neutroni. Per l'invarianza traslazionale, la base di funzione d'onda di singola particella è quella delle onde piane ognuna di queste caratterizzata dal numero d'onda $\mathbf{k} = \mathbf{p}/\hbar c$, dove \mathbf{p} è l'impulso della particella.

Le evidenze empiriche provenienti dalla diffusione elastica di elettroni da nuclei indicano che le distribuzioni di carica nel centro dei nuclei hanno valori simili per i diversi nuclei su tutta la tavola periodica. Semplificando la situazione, consideriamo il nucleo come una sfera a densità costante di raggio R . Quindi la densità costante si ottiene dividendo il numero di nucleoni per il volume della sfera:

$$\rho = \frac{A}{\frac{4}{3}\pi R^3} = \frac{A}{\frac{4}{3}\pi r_0^3 A} = \frac{3}{4\pi r_0^3} = 0.17 \pm 0.02 \text{ fm}^{-3} \quad (5.54)$$

Nell'equazione precedente abbiamo utilizzato la relazione empirica $R = r_0 A^{\frac{1}{3}}$ con $r_0 = 1.12 \text{ fm}$.

Per quanto riguarda il valore dell'energia di legame, consideriamo la formula semi-empirica della massa e analizziamone il comportamento facendo tendere all'infinito sia il volume sia il numero di nucleoni. Ovviamente la quantità per nucleone deve rimanere finita perché possa avere significato fisico.

L'energia di legame di un nucleo espressa dalla formula semi-empirica della massa è:

$$B(A, Z) = a_v A + a_s A^{\frac{2}{3}} + a_c \frac{Z^2}{A^{\frac{1}{3}}} + a_i \frac{(N - Z)^2}{A} + \delta(A) \quad (5.55)$$

Come accennato nell'introduzione, nel sistema considerato abbiamo lo stesso numero di protoni e neutroni. Questa ipotesi che cancella il termine di asimmetria è introdotta per semplificare la trattazione, ma non è necessaria per assicurare la stabilità del sistema. Infatti ci sono studi su materia nucleare asimmetrica, con differente numero di protoni e neutroni, e addirittura studi su materia neutronica. Le stelle di neutroni, che si suppone siano le pulsar, sono al momento i sistemi fisici esistenti in natura più simili alla materia nucleare.

Ben più rilevante l'altra approssimazione menzionata nell'introduzione: l'interazione Coulombiana viene spenta. Questa ipotesi è necessaria per la stabilità del sistema infinito dato che l'interazione coulombiana è a lungo raggio e porterebbe quindi ad una repulsione infinita nel limite per numero di particelle infinito. Utilizzando queste ipotesi, l'espressione dell'energia di legame per nucleone è:

$$\frac{B(A, Z)}{A} = a_v + a_s A^{-\frac{1}{3}} + \frac{\delta(A)}{A} \quad (5.56)$$

e nel limite per A tendente all'infinito sopravvive solo il termine $a_v = 16.0$ MeV.

Una corretta descrizione della materia nucleare deve prevedere un'equazione di stato che leghi l'energia di legame per nucleone con la densità del sistema. Il minimo di questa funzione deve cadere nella regione empirica in cui per $\rho = 0.17 \pm 0.02$, fm^{-3} si ha $B(A, Z)/A = 16.0 \pm 1.0$ MeV.

Dato che il sistema è infinito, esiste invarianza traslazionale. Questo significa che la densità di probabilità di trovare una particella deve essere costante in ogni punto del sistema. Le funzioni d'onda di singola particella che godono di questa proprietà sono le onde piane:

$$\phi_a(\mathbf{r}) = \frac{1}{\Omega^{\frac{1}{2}}} e^{i\mathbf{k}_a \cdot \mathbf{r}} \chi_{s_a} \chi_{t_a} \quad (5.57)$$

dove Ω indica il volume, ed i sottoindici s e t indicano la terza componente dello spin e dell'isospin della particella e χ è il tradizionale spinore di Pauli normalizzato come

$$\chi_s^+ \chi_{s'} = \delta_{s, s'} \quad (5.58)$$

Data l'espressione precedente delle funzioni d'onda di singola particella, ogni prodotto scalare deve essere moltiplicato per un fattore $\Omega/(2\pi)^3$, infatti:

$$\langle \phi_a | \phi_b \rangle = \frac{\Omega}{(2\pi)^3} \int d^3 r \frac{1}{\Omega^{\frac{1}{2}}} e^{-i\mathbf{k}_a \cdot \mathbf{r}} \frac{1}{\Omega^{\frac{1}{2}}} e^{i\mathbf{k}_b \cdot \mathbf{r}} = \frac{\Omega}{(2\pi)^3} \frac{(2\pi)^3 \delta(\mathbf{k}_a - \mathbf{k}_b)}{\Omega} \quad (5.59)$$

Il fattore moltiplicativo necessario per la corretta normalizzazione dei prodotti scalari, è lo stesso anche quando il prodotto scalare viene fatto nello spazio complementare degli implusi.

Se il modulo quadro della funzione d'onda di singola particella dà la probabilità di trovare la particella in un punto dello spazio, per un sistema di particelle non interagenti, la densità totale del sistema, ovvero la probabilità di trovare una particella qualsiasi in un certo punto dello spazio, è data dalla somma delle probabilità prodotta da ogni particella:

$$\rho(\mathbf{r}) = \sum_a^A |\phi_a(\mathbf{r})|^2 \quad (5.60)$$

In questa equazione la somma è limitata al numero A di nucleoni. Successivamente faremo tendere all'infinito questo numero.

Il sistema in oggetto è composto da fermioni che obbediscono al principio di esclusione di Pauli. Dato che ciò che distingue le singole particelle è il loro impulso \mathbf{k} , lo stato fondamentale del sistema sarà configurato in modo che tutti gli stati con $0 \leq |\mathbf{k}| \leq |\mathbf{k}|_F$ siano occupati e tutti gli altri siano vuoti. Il massimo valore dell'impulso, $|\mathbf{k}|_F$ è detto impulso di Fermi, e l'energia associata è detta energia di Fermi. L'espressione della densità del sistema diventa:

$$\begin{aligned} \rho(\mathbf{r}) &= \sum_{a \leq k_F} |\phi_a(\mathbf{r})|^2 = \frac{\Omega}{(2\pi)^3} \int_0^{k_F} d^3k_a \frac{1}{\Omega^{\frac{1}{2}}} e^{-i\mathbf{k}_a \cdot \mathbf{r}} \frac{1}{\Omega^{\frac{1}{2}}} e^{i\mathbf{k}_a \cdot \mathbf{r}} \sum_{s_a} \chi_{s_a}^+ \chi_{s_a} \sum_{t_a} \chi_{t_a}^+ \chi_{t_a} \\ &= \frac{\Omega}{(2\pi)^3} \frac{4}{\Omega} \int_0^{k_F} d^3k_a = \frac{4}{(2\pi)^3} 4\pi \int_0^{k_F} k_a^2 dk_a = \frac{16\pi}{8\pi^3} \frac{k_F^3}{3} = \frac{2}{3\pi^2} k_F^3 \end{aligned} \quad (5.61)$$

Questo risultato mostra come la densità del sistema sia indipendente da \mathbf{r} . Questo era comunque atteso visto che la densità di ogni singola particella lo è. Più rilevante il fatto che sia indipendente dal numero di nucleoni. Inoltre dipende dal momento di Fermi. Utilizzando il valore empirico della densità si trova che il valore del momento di Fermi è $k_F = 1.36 \text{ fm}^{-1} = 250 \text{ MeV}/c$. L'energia cinetica associata al momento di Fermi è:

$$\epsilon_F = \frac{\hbar^2}{2m} k_F^2 = 38.35 \text{ MeV} \quad (5.62)$$

Un calcolo analogo può essere fatto per ottenere l'energia cinetica del sistema. Il valore d'aspettazione dell'energia cinetica di una particella è dato da:

$$\langle \phi_a | \frac{-\hbar^2}{2m} \nabla^2 | \phi'_a \rangle = \frac{\Omega}{(2\pi)^3} \int_0^\infty d^3r \frac{1}{\Omega^{\frac{1}{2}}} e^{-i\mathbf{k}_a \cdot \mathbf{r}} \frac{\hbar^2}{2m} k_a'^2 \frac{1}{\Omega^{\frac{1}{2}}} e^{i\mathbf{k}_a' \cdot \mathbf{r}} \sum_{s_a, t_a} \chi_{s_a}^+ \chi_{s_a'} \chi_{t_a}^+ \chi_{t_a'} = 4 \frac{\hbar^2}{2m} k_a^2$$

L'energia cinetica del sistema è:

$$\begin{aligned} T &= \sum_{a \leq k_F} \langle \phi_a | \frac{-\hbar^2}{2m} \nabla^2 | \phi_a \rangle = \frac{\Omega}{(2\pi)^3} 4 \int_0^{k_F} d^3k_a \frac{\hbar^2}{2m} k_a^2 \\ &= \frac{\Omega}{(2\pi)^3} 4(4\pi) \frac{\hbar^2}{2m} \int_0^{k_F} k_a^2 dk_a k_a^2 = \frac{\Omega}{(2\pi)^3} 16\pi \frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{5} k_F^5 \end{aligned} \quad (5.63)$$

Dalla relazione (5.61) si ottiene un'espressione per k_F^3 che inserita nella precedente equazione dà:

$$T = \Omega \frac{16\pi}{8\pi^3} \frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{5} \left(\frac{3\pi^2}{2} \rho \right) k_F^2 = \frac{3}{5} \Omega \rho \frac{\hbar^2}{2m} k_F^2 = \frac{3}{5} A \frac{\hbar^2}{2m} k_F^2$$

da cui

$$\frac{T}{A} = \frac{3}{5} \epsilon_F \quad (5.64)$$

Definiamo le coordinate relative per due particelle p e q che interagiscono

$$\mathbf{R} = \frac{1}{2}(\mathbf{r}_p + \mathbf{r}_q) \quad ; \quad \mathbf{r} = \mathbf{r}_p - \mathbf{r}_q \quad (5.65)$$

$$\mathbf{K}_{pq} = \mathbf{k}_p + \mathbf{k}_q \quad ; \quad \mathbf{k}_{pq} = \mathbf{k}_p - \mathbf{k}_q \quad (5.66)$$

La funzione d'onda imperturbata delle due particelle è data da

$$\Phi_{pq}(\mathbf{r}_p, \mathbf{r}_q) = \frac{1}{\Omega} e^{i\mathbf{k}_p \cdot \mathbf{r}_p} e^{i\mathbf{k}_q \cdot \mathbf{r}_q} = \frac{1}{\Omega} e^{i\mathbf{K}_{pq} \cdot \mathbf{R}} e^{i\mathbf{k}_{pq} \cdot \mathbf{r}} = \frac{1}{\Omega} e^{i\mathbf{K}_{pq} \cdot \mathbf{R}} \phi_{pq}(\mathbf{r}) \quad (5.67)$$

dove ho trascurato i termini di spin e isospin.

Gli operatori Q e \mathcal{E} definiti precedentemente agiscono su questa funzione d'onda.

$$Q|\Phi_{pq}\rangle = |\Phi_{pq}\rangle \quad (5.68)$$

se sia $|\mathbf{k}_p|$ che $|\mathbf{k}_q|$ sono maggiori di \mathbf{k}_F , e zero altrimenti, e

$$\mathcal{E}|\Phi_{pq}\rangle = [W - \epsilon(\mathbf{k}_p) - \epsilon(\mathbf{k}_q)]|\Phi_{pq}\rangle = e(\mathbf{k}_p, \mathbf{k}_q)|\Phi_{pq}\rangle \quad (5.69)$$

Consideriamo la funzione d'onda delle due particelle che interagiscono

$$\Psi_{pq}(\mathbf{r}_p, \mathbf{r}_q) = \frac{1}{\Omega} e^{i\mathbf{K}_{pq} \cdot \mathbf{R}} \psi_{pq}(\mathbf{r}) \quad (5.70)$$

Data la definizione di (5.2) posso scrivere

$$\begin{aligned} \langle \Phi_{pq} | \mathcal{G} | \Phi_{rs} \rangle &= \int d^3 r_p d^3 r_q \Phi_{pq}(\mathbf{r}_p, \mathbf{r}_q) V(\mathbf{r}) \Psi_{pq}(\mathbf{r}_p, \mathbf{r}_q) \\ &= \frac{1}{(2\pi)^3} \delta(\mathbf{K}_{pq} - \mathbf{K}_{rs}) \int d^3 r e^{i\mathbf{k}_{pq} \cdot \mathbf{r}} V(\mathbf{r}) \psi_{pq}(\mathbf{r}) \equiv \langle \phi_{pq} | \mathcal{G} | \phi_{rs} \rangle \end{aligned} \quad (5.71)$$

La parte relativa alla coordinata del centro di massa del sistema può essere fattorizzata, quindi, considerando la (5.38), otteniamo

$$\psi_{pq}(\mathbf{r}) = \phi_{pq}(\mathbf{r}) + \int d^3 r' K(\mathbf{r}, \mathbf{r}') V(r') \psi_{pq}(\mathbf{r}') \quad (5.72)$$

con

$$K(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \frac{1}{(2\pi)^3} \int d^3 k \frac{Q(\mathbf{K}_{pq}, \mathbf{k})}{e(\mathbf{K}_{pq}, \mathbf{k})} e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}')} \quad (5.73)$$

La procedura per risolvere queste equazioni è composta dai seguenti passi.

1. Scelta di U per fissare le energie di singola particella del denominatore.
2. Soluzione numerica della (5.73).
3. Inserimento del kernel (5.73) nella (5.72).
4. Inserimento della (5.72) nell'elemento di matrice (5.71).

5.6 Considerazioni finali

1. Nella diffusione nel vuoto il denominatore dell'equazione di Lipmann-Schwinger (5.53) ha una parte immaginaria. Questo implica che asintoticamente esista uno sfasamento tra funzione d'onda diffusa e libera. Nella Bethe-Goldstone (5.41) non c'è questo termine immaginario, questo implica che non c'è sfasamento asintotico tra le funzioni d'onda relative di due particelle che interagiscono ψ_{pq} e quelle di particelle non interagenti ϕ_{pq} . La differenza tra queste due funzioni d'onda è presente a distanze relative piccole, dove il potenziale ha un ruolo molto importante, essenzialmente nella regione del core fortemente repulsivo.
2. Il parametro essenziale dello sviluppo di Goldstone non è il numero di linee di interazione, ma il numero di linee buco. Diagrammi che differiscono per una linea di interazione generano contributi dello stesso ordine di grandezza. Al contrario diagrammi con una linea di buco addizionale generano contributi un ordine di grandezza inferiore rispetto a quelli dei diagrammi con una linea di buco in meno. Lo sviluppo in linee di buco è essenzialmente uno sviluppo in potenze della densità. Nella fisica dei multicorpi si parla di densità relativa, ovvero numero di particelle, puntiformi, presenti nel volume definito dal raggio del core fortemente repulsivo.

3. In linea di principio l'interazione \mathcal{G} dovrebbe essere indipendente dalla scelta del potenziale U . In realtà questo avviene solo parzialmente se tronchiamo lo sviluppo di Goldstone (5.1). La convergenza dello sviluppo anche utilizzando l'interazione \mathcal{G} , calcolata usando $H_1 = V$ è molto lenta. L'implementazione della parte perturbativa con un termine ad un corpo $H_1 = V - U$ contribuisce a velocizzare la convergenza. La scelta autoconsistente di U è

$$U = \sum_{\alpha} \langle \phi_{\alpha} | \mathcal{G}(W) | \phi_{\alpha} \rangle \quad (5.74)$$

La scelta *normale* è quella di limitare la somma a stati sotto la superficie di Fermi. In questa scelta c'è quindi una discontinuità nelle energie di singola particella. Quelle sotto la superficie di Fermi sono energie che contengono anche il termine potenziale, mentre quelle sopra sono soltanto energie cinetiche. Questa scelta, relativamente semplice, non garantisce consistenza dei risultati, nel senso che risultano essere estremamente dipendenti dalla scelta di U . Quando si utilizza la scelta *continua*, che consiste nel considerare la somma in (5.74) su tutto lo spazio, si ha una maggiore consistenza del calcolo, ovvero il risultato è praticamente indipendente dalla scelta di U .

Capitolo 6

Applicazioni del principio variazionale

6.1 Introduzione

Il principio variazionale è uno dei metodi più usati per risolvere l'equazione di Schrödinger in maniera approssimata. Si basa sul fatto che la funzione d'onda che minimizza l'energia del sistema è autostato dell'hamiltoniana che descrive il sistema. Questo è vero se la ricerca del minimo viene effettuata in tutto lo spazio di Hilbert. In realtà il problema viene semplificato cercando la funzione che minimizza l'energia in un sottospazio dello spazio di Hilbert. In questo modo si ottiene un limite superiore al valore dell'energia che si otterrebbe risolvendo il problema senza approssimazioni, ovvero considerando l'intero spazio di Hilbert.

Nel primo paragrafo di questo capitolo presento queste caratteristiche del principio variazionale. Gli altri paragrafi sono dedicati alla descrizione dell'applicazione più comune di questo principio, quella che porta alle equazioni di Hartree-Fock.

6.2 Principio variazionale

Consideriamo un sistema composto da molti fermioni descritto dall'hamiltoniana H . L'equazione di Schrödinger corrispondente è

$$H|\Psi\rangle = E|\Psi\rangle , \quad (6.1)$$

dove $|\Psi\rangle$ è l'autostato che descrive il sistema. Qui considererò esclusivamente lo stato fondamentale. Voglio dimostrare che, considerando l'energia del sistema come un funzionale di Ψ , la ricerca del minimo, ovvero la soluzione di

$$\delta E[\Psi] = \delta \frac{\langle \Psi | H | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle} = 0 , \quad (6.2)$$

corrisponde alla soluzione dell'equazione di Schrödinger (6.1).

Riscriviamo la definizione dell'energia definita in (6.2) come

$$E[\Psi] \langle \Psi | \Psi \rangle = \langle \Psi | H | \Psi \rangle , \quad (6.3)$$

e facciamo la variazione

$$\delta E[\Psi] \langle \Psi | \Psi \rangle + E[\Psi] \delta (\langle \Psi | \Psi \rangle) = \delta (\langle \Psi | H | \Psi \rangle)$$

$$\begin{aligned}\delta E[\Psi]\langle\Psi|\Psi\rangle &= \delta(\langle\Psi|H|\Psi\rangle) - E[\Psi]\delta(\langle\Psi|\Psi\rangle) \\ \delta E[\Psi] &= \frac{1}{\langle\Psi|\Psi\rangle} [\delta(\langle\Psi|H|\Psi\rangle) - E[\Psi]\delta(\langle\Psi|\Psi\rangle)] = 0 .\end{aligned}$$

Questo termine è nullo se la parte tra parentesi quadre è nulla

$$\delta(\langle\Psi|H|\Psi\rangle) - E[\Psi]\delta(\langle\Psi|\Psi\rangle) = 0 , \quad (6.4)$$

e poiché E è un numero

$$\langle\delta\Psi|H - E|\Psi\rangle + \langle\Psi|H - E|\Psi\delta\rangle = 0 . \quad (6.5)$$

Dato che Ψ è un funzione complessa la variazione di $\langle\Psi|$ è indipendente da quella di $|\Psi\rangle$. Questo perché la parte reale e quella immaginaria di $|\Psi\rangle$ variano in maniera indipendente. Questo si può vedere sostituendo nella (6.5) $i\delta\Psi$ a $|\delta\Psi\rangle$.

$$-i\langle\delta\Psi|H - E|\Psi\rangle + i\langle\Psi|H - E|\Psi\delta\rangle = i[-\langle\delta\Psi|H - E|\Psi\rangle + \langle\Psi|H - E|\Psi\delta\rangle] = 0 . \quad (6.6)$$

Poiché le equazioni (6.5) e (6.6) devono essere verificate contemporaneamente si ha che

$$\langle\delta\Psi|H - E|\Psi\rangle = 0 \quad \text{e} \quad \langle\Psi|H - E|\Psi\delta\rangle = 0 . \quad (6.7)$$

Dato che $|\delta\Psi\rangle$ è arbitrario deve essere

$$[H - E]|\Psi\rangle = 0 , \quad (6.8)$$

che corrisponde all'equazione di Schrödinger (6.1).

Consideriamo una funzione d'onda di prova $|\Phi\rangle$

$$|\Phi\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} D_n |\Psi_n\rangle \quad (6.9)$$

espressa come combinazione lineare degli autostati di H

$$H|\Psi_n\rangle = E_n|\Psi_n\rangle \quad (6.10)$$

dove D_n sono numeri complessi.

Il funzionale dell'energia può essere espresso come

$$\begin{aligned}E[\Phi] &= \frac{\langle\Phi|H|\Phi\rangle}{\langle\Phi|\Phi\rangle} = \frac{\sum_{n,n'} \langle\Psi_{n'}|D_{n'}^* H D_n |\Psi_n\rangle}{\sum_{n,n'} \langle\Psi_{n'}|D_{n'}^* D_n |\Psi_n\rangle} \\ &= \frac{\sum_{n,n'} D_{n'}^* D_n \langle\Psi_{n'}|H|\Psi_n\rangle}{\sum_{n,n'} D_{n'}^* D_n \langle\Psi_{n'}|\Psi_n\rangle} = \frac{\sum_{nn'} D_{n'}^* D_n E_n \delta_{n,n'}}{\sum_n |D_n|^2} \geq \frac{\sum_n |D_n|^2 E_0}{\sum_n |D_n|^2} = E_0 .\end{aligned} \quad (6.11)$$

Questa disuguaglianza mostra come l'energia ottenuta cercando il minimo del funzionale in un sottospazio di funzioni d'onda di prova possa fornire al massimo un valore maggiore del corretto valore dell'energia del sistema previsto dall'hamiltoniana H .

6.3 Hartree-Fock

6.3.1 Hamiltoniana Hartee-Fock

In questo paragrafo presenterò un'espressione dell'operatore hamiltoniano utile per il suo uso nella teoria Hartree-Fock. Consideriamo l'espressione dell'operatore hamiltoniano nella rappresentazione dei numeri di occupazione Eq. (2.56).

$$\begin{aligned}
 H &= \sum_{\nu\nu'} T_{\nu\nu'} a_{\nu}^{\dagger} a_{\nu'} + \frac{1}{2} \sum_{\nu\nu'\mu\mu'} V_{\nu\nu'\mu\mu'} a_{\nu}^{\dagger} a_{\mu}^{\dagger} a_{\mu'} a_{\nu'} \\
 &= \sum_{\nu\nu'} T_{\nu\nu'} a_{\nu}^{\dagger} a_{\nu'} + \frac{1}{4} \sum_{\nu\nu'\mu\mu'} \bar{V}_{\nu\mu\nu'\mu'} a_{\nu}^{\dagger} a_{\mu}^{\dagger} a_{\mu'} a_{\nu'} .
 \end{aligned} \tag{6.12}$$

Nell'espressione precedente T indica l'operatore dell'energia cinetica e V l'interazione tra due particelle. Sono assenti interazioni a tre o a multicorpi. L'interazione antisimmetrica è definita come

$$\bar{V}_{\nu\mu\nu'\mu'} \equiv \langle \nu\mu | V | \nu'\mu' \rangle - \langle \nu\mu | V | \mu'\nu' \rangle . \tag{6.13}$$

Dalla definizione di contrazione (vedi sezione 3.3) si ha che

$$\overline{a_{\nu}^{\dagger} a_{\nu'}} = \delta_{\nu\nu'} ; \quad \overline{a_{\nu}^{\dagger} a_{\nu'}^{\dagger}} = 0 ; \quad \overline{a_{\nu} a_{\nu'}} = 0 ; \quad \overline{a_{\nu}^{\dagger} a_{\nu'}^{\dagger}} = 0 . \tag{6.14}$$

Considerando la definizione di prodotto normale ordinato N otteniamo

$$a_{\nu}^{\dagger} a_{\nu'} = N[a_{\nu}^{\dagger} a_{\nu'}] + \overline{a_{\nu}^{\dagger} a_{\nu'}} , \tag{6.15}$$

e, per il teorema di Wick,

$$\begin{aligned}
 a_{\nu}^{\dagger} a_{\mu}^{\dagger} a_{\mu'} a_{\nu'} &= N[a_{\nu}^{\dagger} a_{\mu}^{\dagger} a_{\mu'} a_{\nu'}] \\
 &+ N[a_{\mu}^{\dagger} a_{\mu'}] \overline{a_{\nu}^{\dagger} a_{\nu'}} + N[a_{\nu}^{\dagger} a_{\nu'}] \overline{a_{\mu}^{\dagger} a_{\mu'}} \\
 &- N[a_{\mu}^{\dagger} a_{\nu'}] \overline{a_{\nu}^{\dagger} a_{\mu'}} - N[a_{\nu}^{\dagger} a_{\mu'}] \overline{a_{\mu}^{\dagger} a_{\nu'}} \\
 &+ \overline{a_{\mu}^{\dagger} a_{\mu'}} \overline{a_{\nu}^{\dagger} a_{\nu'}} - \overline{a_{\nu}^{\dagger} a_{\mu'}} \overline{a_{\mu}^{\dagger} a_{\nu'}} .
 \end{aligned} \tag{6.16}$$

Inseriamo l'ultima espressione nell'equazione (6.12)

$$\begin{aligned}
 H &= \sum_{\nu\nu'} T_{\nu\nu'} a_{\nu}^{\dagger} a_{\nu'} + \frac{1}{4} \sum_{\mu\mu'\nu\nu'} \bar{V}_{\nu\mu\nu'\mu'} \left\{ N[a_{\nu}^{\dagger} a_{\mu}^{\dagger} a_{\mu'} a_{\nu'}] \right. \\
 &+ N[a_{\mu}^{\dagger} a_{\mu'}] \delta_{\nu\nu'} \delta_{\nu i} + N[a_{\nu}^{\dagger} a_{\nu'}] \delta_{\mu\mu'} \delta_{\mu i} - N[a_{\mu}^{\dagger} a_{\nu'}] \delta_{\nu\mu'} \delta_{\nu i} - N[a_{\nu}^{\dagger} a_{\mu'}] \delta_{\mu\nu'} \delta_{\mu i} \\
 &\left. + \delta_{\nu\nu'} \delta_{\nu i} \delta_{\mu\mu'} \delta_{\mu j} - \delta_{\nu\mu'} \delta_{\nu i} \delta_{\mu\nu'} \delta_{\mu j} \right\}
 \end{aligned} \tag{6.17}$$

dove ho già considerato il fatto che il valore di aspettazione della contrazione su un determinante di Slater è diverso da zero solo se lo stato di singola particella è sotto la superficie di Fermi, cioè uno stato di tipo *buco*. Ho usato la convenzione di indicare con i sottoindici i, j, k, l stati *buco*, e con m, n, p, q, r stati *particella*, cioè al di sopra della superficie di Fermi.

Considerando le restrizioni imposte dagli indici di Kronecker otteniamo:

$$\begin{aligned}
H &= \sum_{\nu\nu'} T_{\nu\nu'} a_{\nu}^+ a_{\nu'} + \frac{1}{4} \sum_{\mu\mu'\nu\nu'} \bar{V}_{\nu\mu\nu'\mu'} N[a_{\nu}^+ a_{\mu}^+ a_{\mu'} a_{\nu'}] \\
&+ \frac{1}{4} \sum_{\mu\mu'i} \bar{V}_{\mu i \mu' i} N[a_{\mu}^+ a_{\mu'}] + \frac{1}{4} \sum_{\nu\nu'i} \bar{V}_{\nu i \nu' i} N[a_{\nu}^+ a_{\nu'}] \\
&- \frac{1}{4} \sum_{\mu\nu'i} \bar{V}_{i \mu \nu' i} N[a_{\mu}^+ a_{\nu'}] - \frac{1}{4} \sum_{\nu\mu'i} \bar{V}_{\nu i i \mu'} N[a_{\nu}^+ a_{\mu'}] \\
&+ \frac{1}{4} \sum_{ij} \bar{V}_{ijij} - \frac{1}{4} \sum_{ij} \bar{V}_{ijji} .
\end{aligned} \tag{6.18}$$

La definizione (6.13) dell'interazione antisimmetrica implica le seguenti simmetrie

$$\bar{V}_{\nu\mu\nu'\mu'} = -\bar{V}_{\mu\nu\nu'\mu'} = \bar{V}_{\mu\nu\mu'\nu'} = -\bar{V}_{\nu\mu\mu'\nu'} , \tag{6.19}$$

quindi

$$\begin{aligned}
H &= \sum_{\nu\nu'} T_{\nu\nu'} a_{\nu}^+ a_{\nu'} + \frac{1}{4} \sum_{\mu\mu'\nu\nu'} \bar{V}_{\nu\mu\nu'\mu'} N[a_{\nu}^+ a_{\mu}^+ a_{\mu'} a_{\nu'}] \\
&+ \sum_{\nu\nu'i} \bar{V}_{\nu i \nu' i} N[a_{\nu}^+ a_{\nu'}] + \frac{1}{2} \sum_{ij} \bar{V}_{ijij} .
\end{aligned} \tag{6.20}$$

Consideriamo il prodotto normale ordinato di due operatori, e riscriviamolo secondo la definizione di contrazione

$$N[a_{\nu}^+ a_{\nu'}] = a_{\nu}^+ a_{\nu'} - \overline{a_{\nu}^+ a_{\nu'}} , \tag{6.21}$$

quindi il penultimo termine della (6.20) diventa

$$\sum_{\nu\nu'i} \bar{V}_{\nu i \nu' i} N[a_{\nu}^+ a_{\nu'}] = \sum_{\nu\nu'i} \bar{V}_{\nu i \nu' i} a_{\nu}^+ a_{\nu'} - \sum_{ij} \bar{V}_{ijij} , \tag{6.22}$$

e l'operatore hamiltoniano può essere scritto come

$$\begin{aligned}
H &= \sum_{\nu\nu'} \left(T_{\nu\nu'} + \sum_i \bar{V}_{\nu i \nu' i} \right) a_{\nu}^+ a_{\nu'} \\
&+ \frac{1}{4} \sum_{\mu\mu'\nu\nu'} \bar{V}_{\nu\mu\nu'\mu'} N[a_{\nu}^+ a_{\mu}^+ a_{\mu'} a_{\nu'}] - \frac{1}{2} \sum_{ij} \bar{V}_{ijij} .
\end{aligned} \tag{6.23}$$

L'operatore hamiltoniano è composto da un termine ad un corpo, quello proporzionale a $a_{\nu}^+ a_{\nu'}$ più altri termini. È interessante notare che anche parte dell'interazione \bar{V} contribuisce al termine ad un corpo. Dato che non abbiamo fatto alcuna ipotesi sulla struttura della base di funzioni d'onda di singola particella che compongono il determinante di Slater sul quale operano gli operatori di creazione e di distruzione, possiamo usare la base di funzioni d'onda di singola particella che diagonalizza il termine ad un corpo della (??), ovvero

$$h_{\nu\nu'} = T_{\nu\nu'} + \sum_i \bar{V}_{\nu i \nu' i} , \tag{6.24}$$

quindi

$$\langle \nu | h | \nu \rangle = \epsilon_{\nu} . \tag{6.25}$$

In questa base, l'operatore hamiltoniano può essere scritto come

$$H = \sum_{\nu} \epsilon_{\nu} a_{\nu}^{\dagger} a_{\nu} - \frac{1}{2} \sum_{ij} \bar{V}_{ijij} + \frac{1}{4} \sum_{\mu\mu'\nu\nu'} \bar{V}_{\nu\mu\nu'\mu'} N[a_{\nu}^{\dagger} a_{\mu}^{\dagger} a_{\mu'} a_{\nu'}] = H_0 + V_{\text{res}} \quad , \quad (6.26)$$

dove ho definito con H_0 il termine ad un corpo, e con V_{res} , detta interazione residua, il termine rimanente.

Il valore di aspettazione dell'operatore (6.26) sullo stato fondamentale del determinante di Slater costruito con gli autostati di h è

$$\begin{aligned} \langle \Phi_0 | H | \Phi_0 \rangle &= \langle \Phi_0 | H_0 | \Phi_0 \rangle + \langle \Phi_0 | V_{\text{res}} | \Phi_0 \rangle \\ &= \sum_{\nu} \epsilon_{\nu} \langle \Phi_0 | a_{\nu}^{\dagger} a_{\nu} | \Phi_0 \rangle - \frac{1}{2} \sum_{ij} \bar{V}_{ijij} \langle \Phi_0 | \Phi_0 \rangle \\ &+ \frac{1}{4} \sum_{\mu\mu'\nu\nu'} \bar{V}_{\nu\mu\nu'\mu'} \langle \Phi_0 | N[a_{\nu}^{\dagger} a_{\mu}^{\dagger} a_{\mu'} a_{\nu'}] | \Phi_0 \rangle \\ &= \sum_i \epsilon_i - \frac{1}{2} \sum_{ij} \bar{V}_{ijij} = \tilde{E}_0 \quad . \end{aligned} \quad (6.27)$$

I risultati importanti di questo paragrafo possono essere così riassunti.

- L'espressione (6.26) dell'hamiltoniano è solo una riscrittura dell'espressione (6.12) dove viene utilizzato il prodotto normale ordinato. Non c'è alcuna differenza nel contenuto fisico delle due espressioni.
- Il calcolo del valore di aspettazione dell'operatore hamiltoniano calcolato per lo stato fondamentale descritto in termini di determinante di Slater trascura una parte dell'hamiltoniana. Quando si descrive un sistema a molti corpi in termini di determinante di Slater, ovvero quando si usa un modello a particelle indipendenti, il contributo del termine dell'hamiltoniano legato al prodotto normale ordinato è, per definizione, nullo. Questa è la grande semplificazione intrinseca ai modelli a particelle indipendenti. Il termine che si trascura è quello che viene definito come *interazione residua*. La parte dell'operatore ad un corpo H_0 è responsabile del modello a particelle indipendenti. Fenomeni che vanno oltre questa descrizione sono dovuti alla presenza dell'interazione residua V_{res} , e sono genericamente definiti come *correlazioni a lungo raggio* per distinguerli dagli effetti legati al core fortemente repulsivo dell'interazione, indicati come *correlazioni a corto raggio*.
- L'energia totale del sistema a molti corpi nell'ambito di un modello a campo medio può essere calcolata solo conoscendo l'interazione a due corpi V . L'espressione (6.27) indica che l'energia totale non è semplicemente la somma delle energie degli stati di singola particella.

6.3.2 Equazioni di Hartree-Fock

Il calcolo dell'energia del sistema è effettuato utilizzando l'espressione (6.27). Nella teoria Hartree-Fock si cerca il determinante di Slater che minimizza questo valore. Si tratta quindi di ricercare il minimo di E_0 nel sottospazio di Hilbert formato da tutti i possibili determinanti di Slater. Il principio variazionale viene applicato scegliendo l'insieme di funzioni d'onda di singola particella che formano il determinante di Slater. Per poter formare il determinante è necessario che le funzioni d'onda di singola particella siano ortonormalizzate. Questa è una condizione esterna che deve essere imposta. Il problema consiste quindi nella ricerca di minimo vincolato che trattiamo con la tecnica dei moltiplicatori di Lagrange. Il principio variazionale con la condizione di ortonormalizzazione è espresso come

$$\delta \left[E(\Phi) - \sum_{ij} \lambda_{ij} \langle i | j \rangle \right] = 0 \quad , \quad (6.28)$$

ed utilizzando l'operatore hamiltoniano H

$$\delta\langle\Phi|H|\Phi\rangle - \sum_{ij} \lambda_{ij} \delta\langle i|j\rangle = 0 \quad , \quad (6.29)$$

dove $|\Phi\rangle$ è il determinante di Slater è formato dalle funzioni d'onda $|i\rangle$ e ho indicato con λ_{ij} i moltiplicatori di Lagrange. Usando l'espressione (6.23) dell'operatore hamiltoniano ottengo

$$\sum_i \delta\langle i|T|i\rangle + \frac{1}{2} \sum_{ij} [\delta\langle ij|V|ij\rangle - \delta\langle ij|V|ji\rangle] - \sum_{ij} \lambda_{ij} \delta\langle i|j\rangle = 0 \quad . \quad (6.30)$$

La variazione del prodotto delle due funzioni d'onda

$$\sum_{ij} \delta\langle ij| = \sum_{ij} [\langle\delta ij| + \langle i\delta j|] = 2 \sum_{ij} \langle\delta ij| \quad , \quad (6.31)$$

quindi

$$\sum_i \langle\delta i|T|i\rangle + \sum_{ij} [\langle\delta ij|V|ij\rangle - \langle\delta ij|V|ji\rangle] - \sum_{ij} \lambda_{ij} \langle\delta i|j\rangle = 0 \quad . \quad (6.32)$$

Dato che ogni variazione delle funzioni d'onda $\langle\delta i|$ è indipendente dall'altra, ogni termine della somma su i nell'espressione precedente deve essere nullo, quindi

$$\langle\delta k|T|k\rangle + \sum_j [\langle\delta k|\langle j|V|j\rangle|k\rangle - \langle\delta k|\langle j|V|k\rangle|j\rangle] = \sum_j \lambda_{kj} \langle\delta k|j\rangle \quad . \quad (6.33)$$

Poiché $|\delta k\rangle$ è diverso da zero, possiamo semplificare l'espressione precedente

$$T|k\rangle + \sum_j [\langle j|V|j\rangle|k\rangle - \langle j|V|k\rangle|j\rangle] = \sum_j \lambda_{kj} |j\rangle \quad . \quad (6.34)$$

Supponiamo che il moltiplicatore di Lagrange λ_{ij} sia il valore di aspettazione di un'hamiltoniana h

$$\lambda_{kj} = \langle k|h|j\rangle \quad . \quad (6.35)$$

È possibile trovare una base di singola particella che diagonalizzi h utilizzando una trasformazione unitaria.

$$\langle\tilde{k}|h|\tilde{j}\rangle = \epsilon_k \delta_{kj} \quad . \quad (6.36)$$

La trasformazione unitaria da una base all'altra è data da

$$|\tilde{k}\rangle = \sum_{k'} S_{kk'} |k'\rangle \quad \sum_{kk'} S_{kk'}^\dagger S_{k'k} = 1 \quad . \quad (6.37)$$

Il determinante di Slater nella nuova base è data da

$$|\tilde{\Phi}\rangle = \det(S)|\Phi\rangle \quad (6.38)$$

poiché S è unitaria si ha che $|\det(S)| = 1$, il determinante nelle due basi è lo stesso a meno di una fase. Questo significa che il funzionale $E(\Phi)$ è invariante sotto la trasformazione di base e quindi anche la sua variazione lo è.

Nella nuova base

$$h|k\rangle = T|k\rangle + \sum_j [\langle j|V|j\rangle|k\rangle - \langle j|V|k\rangle|j\rangle] = \epsilon_k |k\rangle \quad . \quad (6.39)$$

Definisco il potenziale medio come

$$U(\mathbf{r}) = \sum_j \langle j|V|j \rangle = \sum_j \int d^3r' \phi_j^*(\mathbf{r}') V(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \phi_j(\mathbf{r}') , \quad (6.40)$$

legato al termine detto di Hartree. La somma è effettuata su tutti gli stati al di sotto dell'energia di Fermi. Quindi questo termine descrive l'interazione della particella k con tutte le altre. L'altro termine è non locale ed è legato al termine di Fock - Dirac

$$W(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \sum_j \phi_j^*(\mathbf{r}') V(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \phi_j(\mathbf{r}) . \quad (6.41)$$

Nello spazio delle configurazioni l'equazione (6.39) può essere espressa come

$$h\phi_k(\mathbf{r}) = -\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} \phi_k(\mathbf{r}) + \underbrace{U(\mathbf{r})\phi_k(\mathbf{r})}_{\text{Hartree}} - \underbrace{\int d^3r' W(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \phi_k(\mathbf{r}')}_{\text{Fock-Dirac}} = \epsilon_k \phi_k(\mathbf{r}) . \quad (6.42)$$

Trascurando il termine di Fock - Dirac si ottiene un'equazione differenziale tipo campo medio. Il termine di Fock - Dirac, detto anche di scambio, modifica la pura equazione di campo medio inserendo l'effetto del principio di esclusione di Pauli.

Le equazioni differenziali (6.42) sono risolte numericamente utilizzando una procedura iterativa. Si parte da funzioni d'onda di prova $|k\rangle_{(i)}$ costruite con metodi di campo medio, ad esempio oscillatore armonico, Woods - Saxon, funzioni idrogenoidi. Con queste funzioni d'onda di prova si calcolano i potenziali di Hartree (6.40) e di Fock-Dirac (6.41) che vengono inseriti nell'equazione differenziale (6.42). La soluzione delle equazioni (6.42), risolte con metodi numerici standard, produce un nuovo insieme di funzioni d'onda $|k\rangle_{(i+1)}$ con le quali è possibile calcolare nuovi potenziali U e W . Il processo continua fino a convergenza. Normalmente il criterio di convergenza viene fissato considerando le modifiche dell'energia totale del sistema (6.27).

Teorema di Koopman

Il significato fisico del moltiplicatore di Lagrange ϵ_k è chiarito da quello che viene definito come *Teorema di Koopman*. Consideriamo il determinante di Slater che descrive un sistema composto $A - 1$ particelle

$$|\Phi(A - 1)\rangle = \frac{a_k |\Phi_0(A)\rangle}{\mathcal{N}(A)} , \quad (6.43)$$

dove $\mathcal{N}(A)$ è una costante di normalizzazione.

La differenza tra le energie del sistema con A particelle, e quello con $A - 1$ particelle è data da

$$\begin{aligned} E(A) - E(A - 1) &= \frac{\langle \Phi(A) | H | \Phi(A) \rangle}{\langle \Phi(A) | \Phi(A) \rangle} - \frac{\langle \Phi(A - 1) | H | \Phi(A - 1) \rangle}{\langle \Phi(A - 1) | \Phi(A - 1) \rangle} \\ &= \left[\sum_{i=1, A} \epsilon_i - \frac{1}{2} \sum_{i=1, A; j=1, a} \bar{V}_{ijij} \right] - \left[\sum_{i=1, A; i \neq k} \epsilon_i - \frac{1}{2} \sum_{i=1, A; i \neq k} \sum_{j=1, A; j \neq k} \bar{V}_{ijij} \right] \\ &= \left[\sum_{i=1, A} - \sum_{i=1, A; i \neq k} \right] \epsilon_i - \frac{1}{2} \left[\sum_{ij} - \sum_{ij; i \neq k, j \neq k} \right] \bar{V}_{ijij} \\ &= \epsilon_k - \frac{1}{2} \bar{V}_{kkkk} = \epsilon_k , \end{aligned} \quad (6.44)$$

dove $\bar{V}_{kkkk} = 0$. Quindi ϵ_k , fino a questo momento considerato moltiplicatore di Lagrange, è la differenza di energia tra sistemi che differiscono tra loro di un particella. Questa è la definizione operativa dell'energia di singola particella.

6.3.3 Hartree-Fock nel gas di Fermi

Un'applicazione semplice della teoria di Hartree-Fock è la descrizione di un sistema infinito ed omogeneo di fermioni, quel sistema che nel paragrafo 1.3 abbiamo considerato e definito come *gas di Fermi*.

Riscrivo le equazioni Hartree-Fock nello spazio delle coordinate

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\phi_k(\mathbf{r}) + \sum_{k' \leq k_F} \int d^3r' |\phi_{k'}(\mathbf{r}')|^2 V(\mathbf{r}, \mathbf{r}') - \sum_{k' \leq k_F} \int d^3r' \phi_{k'}^*(\mathbf{r}') V(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \phi_k(\mathbf{r}') \phi_{k'}(\mathbf{r}) , \quad (6.45)$$

dove le somme sugli stati occupati sono indicate come somme sul numero d'onda il cui valore è inferiore al numero d'onda di Fermi, k_F . L'invarianza traslazionale implica che $V(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = V(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$, poiché non esiste un punto centrale a cui fare riferimento, o, meglio, perché il sistema è invariante qualunque sia il centro delle coordinate scelto per la sua descrizione. Ovviamente le funzioni d'onda sono autostati dell'impulso $\mathbf{p} = \hbar\mathbf{k}$, le onde piane definite nell'equazione (1.40), e soddisfano l'equazione di Schrödinger di particella libera

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\phi_k(\mathbf{r}) = \epsilon_k^{(0)}\phi_k(\mathbf{r}) . \quad (6.46)$$

Vale la pena mettere in evidenza che il termine $V(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$ indica l'interazione tra due fermioni che compongono il sistema. Nel caso del gas di Fermi non c'è alcuna interazione tra le particelle che compongono il sistema. Ogni particella si muove indipendentemente dalla presenza delle altre in un potenziale uniforme e costante che si può anche eliminare definendo lo zero dell'energia in maniera appropriata. La teoria di Hartree-Fock propone ancora una soluzione approssimata del problema perché richiede che la funzione d'onda totale che lo descrive sia un determinante di Slater, ma accende una interazione tra i fermioni e, inoltre, considera il principio di esclusione di Pauli.

Definiamo la trasformata di Fourier dell'interazione tra i due fermioni come

$$v(\mathbf{k}) = \int d^3x V(\mathbf{x}) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} . \quad (6.47)$$

Considero il terzo termine della (6.45), il termine di Fock-Dirac, inserendo il termine di normalizzazione (1.48)

$$\begin{aligned} & \frac{\mathcal{V}}{(2\pi)^3} \int d^3k' \Theta(k_F - k) \int d^3\mathbf{r}' \frac{e^{-i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{r}'}}{\mathcal{V}^{1/2}} [e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} e^{-i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{r}}] V(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \frac{e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}'}}{\mathcal{V}^{1/2}} \frac{e^{-i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{r}'}}{\mathcal{V}^{1/2}} \\ &= \frac{1}{(2\pi)^3} \int d^3k' \Theta(k_F - k) \int d^3(r' - r) e^{i(\mathbf{k}' - \mathbf{k})\cdot(\mathbf{r}' - \mathbf{r})} V(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \frac{e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}}{\mathcal{V}^{1/2}} \\ &= \frac{1}{(2\pi)^3} \int d^3k' \Theta(k_F - k) v(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \frac{e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}}{\mathcal{V}^{1/2}} . \end{aligned} \quad (6.48)$$

Dato che la densità del sistema è definita come, (1.51),

$$\rho(r) = \sum_{k \leq k_F} |\phi_a(\mathbf{r})|^2 , \quad (6.49)$$

usando la (6.46) posso riscrivere l'equazione di Hartree-Fock (6.45) come

$$\left[\epsilon_k^{(0)} + \rho v(0) - \frac{1}{(2\pi)^3} \int d^3k' \Theta(k_F - k) v(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \right] \phi_k(\mathbf{r}) = \epsilon_k \phi_k(\mathbf{r}) . \quad (6.50)$$

dove

$$v(0) = \int d^3x v(\mathbf{x}) \quad (6.51)$$

è detto integrale di volume dell'interazione.

La presenza dell'interazione modifica l'energia della particella libera

$$\epsilon_k = \epsilon_k^{(0)} + \mathcal{U}_{\text{HF}}(\mathbf{k}) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + \mathcal{U}_{\text{HF}}(\mathbf{k}) , \quad (6.52)$$

dove

$$\mathcal{U}_{\text{HF}}(\mathbf{k}) = \rho v(0) - \frac{1}{(2\pi)^3} \int d^3 k' \Theta(k_F - k') v(\mathbf{k} - \mathbf{k}') . \quad (6.53)$$

6.4 Teoria del funzionale densità (DFT)

Il modello di Hartree-Fock viene ampiamente utilizzato nell'ambito della fisica atomica e nucleare. Tuttavia ci sono due tipi di problemi legati al suo uso. Il primo problema è di tipo formale ed emerge soprattutto nell'ambito della fisica nucleare. L'interazione effettiva da utilizzare in calcoli Hartree-Fock deve contenere termini dipendenti dalla densità del sistema. Quale parte dell'interazione nucleone-nucleone microscopica sia simulata da questa dipendenza dalla densità è ancora motivo di studio. Il fatto è che senza questi termini i calcoli Hartree-Fock non riescono a riprodurre energie di legame e densità dei nuclei, mentre l'aggiunta di questo termine permette di definire una interazione effettiva utilizzabile in tutta la tavola periodica che produce risultati di alta qualità. Il principio variazionale sopra definito non è formalmente valido se l'interazione dipende dalla densità.

Il secondo problema è pragmatico e consiste nella difficoltà di calcolare il termine di Fock-Dirac in Eq.(6.42). Nuclei e atomi, anche se deformati, sono sistemi che si sviluppano attorno ad un punto che può essere convenientemente utilizzato come centro del sistema di riferimento. Anche in questi sistemi il calcolo del termine di Fock-Dirac non è banale, ma gestibile. Ben diversa è la situazione della descrizione di molecole complicate che non hanno un preciso centro di riferimento. In questi sistemi il calcolo del termine di Fock-Dirac diventa proibitivo.

La teoria del funzionale della densità, Density Functional Theory (DFT), risolve entrambi i problemi. La teoria si basa su un teorema formulato nella seconda metà degli anni '60 del secolo scorso. Su questa base teorica si è costruita una serie di equazioni che assomigliano molto alle equazioni Hartree-Fock ma con un termine di scambio e correlazione locale che sostituisce il termine di Fock-Dirac.

6.4.1 Teorema di Hohenberg-Kohn

Il punto di partenza della DFT è il teorema di Hohenberg-Kohn (HK) che assicura che lo stato fondamentale di un sistema di molte particelle può essere completamente caratterizzato dalla densità e da quantità che le sono strettamente collegate. Consideriamo l'hamiltoniana di un sistema di A fermioni a spin $1/2$ espressa come

$$H = T + V_{ext} + W , \quad (6.54)$$

dove

$$T = \sum_{i=1} -i\hbar^2 \frac{\nabla_i^2}{2m} , \quad V_{ext} = \sum_{i=1} v_{ext}(i) , \quad W = \frac{1}{2} \sum_{ij} w(i, j) , \quad (6.55)$$

dove tutte le somme corrono su tutti gli A fermioni. Il termine di energia cinetica, T , e del potenziale V_{ext} , detto *esterno* sono operatori ad un corpo, mentre il termine W di interazione tra i fermioni è un potenziale a due corpi. Il termine di energia cinetica più il termine di interazione W sono caratteristiche del sistema di fermioni, mentre il termine V_{ext} dipende da situazioni esterne, e quindi può, in principio essere modificato. Ad esempio in un atomo V_{ext} è dovuto all'interazione degli elettroni con il nucleo, e può essere modificato se il numero di neutroni del nucleo cambia modificando così la distribuzione di carica, a parità totale di carica. Se si considera un gas di elettroni generato da un sistema cristallino, il

campo esterno può essere modificato cambiando la posizione degli ioni del cristallo, oppure considerando il sistema di cariche positive come una distribuzione uniforme con definita densità di carica, il *jellium*. Nel caso del nucleo il campo esterno può essere un campo medio nel quale sono immersi i vari nucleoni, ad esempio un potenziale Woods-Saxon o Oscillatore Armonico.

Consideriamo l'insieme di tutte le Hamiltoniane della forma (6.55) che abbiamo stati fondamentali non degeneri, ovvero l'insieme di tutti i potenziali esterni V_{ext} che generano uno stato fondamentale $|\Psi_0\rangle$. Questo insieme di Hamiltoniane contengono non solo potenziali fisicamente accettabili, ma anche un numero infinito di potenziali che hanno una valenza puramente matematica. In aggiunta, per ogni V_{ext} esiste un numero infinito di copie ovvie ottenute aggiungendo una costante. Queste copie generano lo stesso stato fondamentale, quindi, dal punto di vista della fisica sono equivalenti. La presenza di stati degeneri può essere rimossa inserendo una piccola perturbazione che rimuove la simmetria del sistema.

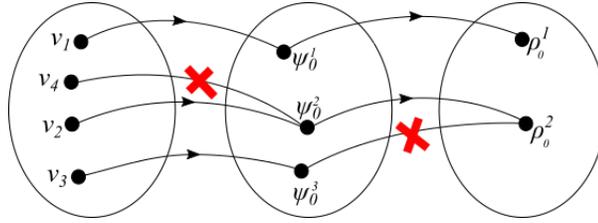


Figura 6.1:

Il teorema afferma che esiste una corrispondenza biunivoca tra potenziale esterno V_{ext} lo stato fondamentale $|\Psi_0\rangle$ e la densità, di numero,

$$\rho_0(\mathbf{r}) = \langle \Psi_0 | \sum_{i=1}^N \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i) | \Psi_0 \rangle \quad (6.56)$$

Il teorema afferma che non è possibile che uno stesso potenziale generi più di uno stato fondamentale, e che uno stato fondamentale sia generato da più di un potenziale esterno. In aggiunta, ogni stato fondamentale genera una sola densità ρ_0 , e ogni densità non viene generata da più di uno stato Ψ_0 . Questo è indicato schematicamente nella Fig. 6.1 dove si indica che $\Psi_0^{(2)}$ è generato solo da v_2 , e $\rho_0^{(2)}$ generata solo da $\Psi_0^{(2)}$. L'osservazione importante del teorema è che le due mappe sono iniettive, e quindi uniche.

La prova del teorema implica due passi

- (i) per ogni V_{ext} esiste solo un Ψ_0 ,
- (ii) non c'è alcun Ψ_0 che è simultaneamente stato fondamentale di due potenziali V_{ext} e V'_{ext} che possono differire per una costante al massimo.

(i) Visto che consideriamo un sistema non degeneri, per definizione per ogni hamiltoniana esiste un solo Ψ_0 .

(ii) La prova del secondo punto è fatta per assurdo. Ipotizziamo che lo stesso stato $|\Psi_0\rangle$ sia autostato di due hamiltoniane che differiscono per più di una costante.

$$\begin{aligned} H|\Psi_0\rangle &= [T + W + V_{ext}]|\Psi_0\rangle = E_0|\Psi_0\rangle \\ H'|\Psi_0\rangle &= [T + W + V'_{ext}]|\Psi_0\rangle = E'_0|\Psi_0\rangle . \end{aligned}$$

Sottraendo membro a membro otteniamo

$$[V_{ext} + V'_{ext}]|\Psi_0\rangle = (E_0 - E'_0)|\Psi_0\rangle$$

Dividendo per $|\Psi_0\rangle$ otteniamo

$$\sum_i [v_{ext}(\mathbf{r}_i) - v'_{ext}(\mathbf{r}_i)] = E_0 - E'_0$$

Teniamo fisse le $A - 1$ coordinate e facciamo cambiare una sola coordinata. L'equazione di sopra porta una contraddizione poiché la parte sinistra viene modificata, mentre la parte destra rimane costante. Questo dimostra che ogni V_{ext} , a meno di una costante, definisce un'hamiltoniana con un solo autostato che descrive lo stato fondamentale.

Anche la seconda parte dell'affermazione, ovvero che ogni densità ρ_0 è generata da un solo stato Ψ_0 , è dimostrata per assurdo. Ipotizziamo che la stessa densità sia generata sia da Ψ_0 che da Ψ'_0 autostati delle hamiltoniane H e H' definite sopra. Per il principio variazionale di Rietz otteniamo la diseuguaglianza

$$E_0 = \langle \Psi_0 | H | \Psi_0 \rangle < \langle \Psi'_0 | H | \Psi'_0 \rangle \quad (6.57)$$

dove H è l'hamiltoniana di cui Ψ_0 è autostato, e la diseuguaglianza deriva dal fatto che non c'è degenerazione nel sistema. Posso riscrivere la parte destra aggiungendo e sottraendo V'_{ext}

$$\begin{aligned} E_0 &< \langle \Psi'_0 | [(T + W + V_{ext}) + V'_{ext} - V'_{ext}] | \Psi'_0 \rangle = \langle \Psi'_0 | [(T + W + V'_{ext}) + V_{ext} - V'_{ext}] | \Psi'_0 \rangle \\ &= E'_0 + \langle \Psi'_0 | V_{ext} - V'_{ext} | \Psi'_0 \rangle \end{aligned}$$

Il contributo del potenziale esterno ad un corpo può essere scritto come

$$\langle \Psi'_0 | \sum_i v_{ext}(\mathbf{r}_i) | \Psi'_0 \rangle = \int d^3r v_{ext}(\mathbf{r}) \langle \Psi'_0 | \sum_i \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i) | \Psi'_0 \rangle = \int d^3r v_{ext}(\mathbf{r}) \rho_0(\mathbf{r})$$

quindi possiamo scrivere

$$E_0 < E'_0 + \int d^3r [v_{ext}(\mathbf{r}) - v'_{ext}(\mathbf{r})] \rho_0(\mathbf{r})$$

Tutto il ragionamento è stato fatto supponendo la (6.57), ma potrebbe essere ripetuto invertendo il ruolo delle due hamiltoniane. Si otterrebbe quindi

$$E_0 + E'_0 < E_0 + E'_0$$

che è un assurdo, per questa ragione c'è una mappatura univoca tra $|\Psi_0\rangle$ e ρ .

Il teorema di Hoenberg-Kohn ha le seguenti implicazioni.

- (a) Considerando insieme le due mappe, c'è una corrispondenza biunivoca tra il potenziale esterno V_{ext} e lo stato fondamentale, non degenere, $|\Psi_0\rangle$ che risulta dalla soluzione dell'equazione di Schrödinger e la densità dello stato fondamentale ρ_0

$$V_{ext} \iff |\Psi_0\rangle \iff \rho. \quad (6.58)$$

Questo significa che le tre quantità sono legata da mappature biunivoche. Possiamo quindi considerare gli stati come funzionali della densità $|\Psi_0[\rho]\rangle$

- (b) L'esistenza del funzionale $|\Psi_0[\rho]\rangle$ implica l'affermazione che ogni osservabile sia un funzionale della densità $O[\rho]$. In particolare questo è vero per l'energia del sistema

$$E[\rho] = \langle \Psi[\rho] | H | \Psi[\rho] \rangle F[\rho] + \int d^3r v_{ext}(\mathbf{r}) \rho_0(\mathbf{r}) \quad (6.59)$$

dove la parte universale, cioè indipendente dal potenziale esterno, è definita come

$$F[\rho] \equiv \langle \Psi[\rho] | T + W | \Psi[\rho] \rangle \quad (6.60)$$

- (c) Esiste un principio di minimo per E . Se ρ_0 è la densità dello stato fondamentale che corrisponde ad uno specifico valore di V_{ext} , allora per ogni $\rho \neq \rho_0$ si ha che

$$E_0 \equiv E[\rho_0] < E[\rho] \quad (6.61)$$

Questa è una conseguenza dell'unicità della relazione tra densità, autostato e potenziale esterno e del principio variazionale di Ritz.

6.4.2 Equazioni di Kohn e Sham

L'applicazione del teorema di Hohenberg-Kohn è basata sull'idea di costruire la densità ρ_0 dello stato fondamentale del sistema di fermioni interagenti usando un fittizio sistema di fermioni non interagenti, cambiando l'hamiltoniana del sistema. L'idea è rappresentata graficamente nella figura 6.2. La linea

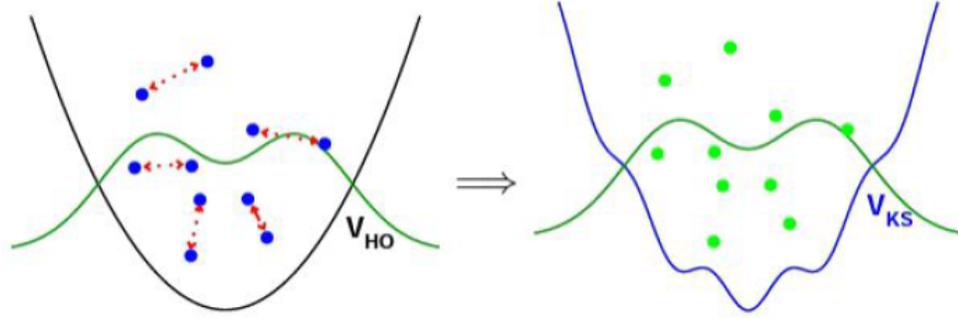


Figura 6.2:

verde rappresenta la densità, ed è uguale nel sistema a sinistra, fermioni interagenti, e in quello a destra. Nel sistema a sinistra il potenziale esterno è V_{HO} molto diverso dal potenziale esterno V_{KS} . Il primo potenziale è inserito nell'hamiltoniana contenente W , mentre il secondo è utilizzato in una hamiltoniana che non contiene W .

L'idea di descrivere un sistema di fermioni interagenti utilizzando un sistema effettivo di fermioni non interagenti è analoga a quella utilizzata da Landau nella descrizione dei liquidi fermionici. In questo secondo caso, però, vengono modificate le proprietà dei singoli fermioni che acquisiscono masse e cariche effettive. In questo caso, invece, viene modificata l'hamiltoniana di base cambiando i potenziali esterni al sistema.

L'idea è quella di descrivere la densità (6.56) come somma di funzioni d'onda ortonormalizzate di singola particella

$$\rho_0(\mathbf{r}) = \rho_0^{KS}(\mathbf{r}) = \sum_{i < \epsilon_F} |\phi_i^{KS}(\mathbf{r})|^2 \quad (6.62)$$

dove KS indica Kohn-Sham. La densità (6.62) è generata da un'hamiltoniana ad un corpo, il cui autostato è un determinante di Slater $|\Phi^{KS}\rangle$.

Il funzionale dell'energia costruito in questo sistema viene comunemente espresso come

$$E[\rho_0] = T^{KS}[\rho_0] + E_H^{KS}[\rho_0] + E_{ext}^{KS}[\rho_0] + E_{xc}^{KS}[\rho_0] \quad (6.63)$$

dove si ha il termine di energia cinetica

$$T^{KS}[\rho_0] = \langle \Phi^{KS} | T | \Phi^{KS} \rangle = \int d^3r \sum_i \phi_i^{*KS}(\mathbf{r}) \left(-\frac{\hbar^2 \nabla_i^2}{2m} \right) \phi_i^{KS}(\mathbf{r}) \quad (6.64)$$

di Hartree

$$E_{\text{H}}^{\text{KS}}[\rho_0] = \sum_{ij} \int d^3r_i \int d^3r_j \rho_0(\mathbf{r}_i) w(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j) \rho_0(\mathbf{r}_j) \quad (6.65)$$

di campo medio esterno

$$E_{\text{ext}}^{\text{KS}}[\rho_0] = \sum_i \int d^3r \rho_0(\mathbf{r}) v_{\text{ext}}^{\text{KS}}(\mathbf{r}) \quad (6.66)$$

e il termine di scambio e correlazione $E_{\text{xc}}^{\text{KS}}$.

Applicando il principio variazionale come nel caso Hartree-Fock si ottiene un'equazione differenziale analoga

$$\left\{ -\frac{\hbar^2 \nabla_i^2}{2m} + \int d^3r_j w(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j) \rho_0(\mathbf{r}_j) + v_{\text{ext}}^{\text{KS}}(\mathbf{r}_i) + v_{\text{xc}}^{\text{KS}}(\mathbf{r}_i) \right\} \phi_i^{\text{KS}}(\mathbf{r}) = \epsilon_i \phi_i^{\text{KS}}(\mathbf{r}) . \quad (6.67)$$

Anche questa equazione differenziale viene risolta con metodologie iterative come l'equazione Hartree-Fock. Questo risultato deve essere commentato.

- A differenza dell'equazione di Hartree-Fock nell'equazione (6.67) ci sono solo termini locali. Questo rende più semplice la soluzione numerica dell'equazione.
- Dal punto di vista operatoriale i termini di energia cinetica e di Hartree del funzionale di Khon-Sham sono identici a quelli del sistema interagente. Questo non significa che dal punto di vista quantitativo i valori dell'energia cinetica e del termine di Hartree sono differenti nei due sistemi. Infatti i valori di aspettazione sono calcolati tra il determinante di Slater per il funzionale Khon-Sham e tra $|\Psi_0\rangle$ per il sistema interagente.
- Nel funzionale dell'energia di Khon-Sham (6.63) la parte che somma i termini di energia cinetica di Hartree e del potenziale esterno danno un contributo molto più grande del contributo del termine di scambio e correlazione.
- Le equazioni di Khon-Sham (6.63) sono equivalenti alla minimizzazione dell'energia dello stato fondamentale del sistema, nello stesso spirito delle equazioni Hartree-Fock. Questo per la corrispondenza biunivoca tra densità e funzionale dell'energia.
- Il determinante di Slater $|\Phi^{\text{KS}}\rangle$ non rappresenta l'esatto stato fondamentale $|\Psi_0\rangle$. Tutto l'impianto della DFT è basato sull'uguaglianza delle densità (6.62). Le densità ad un corpo contengono informazioni molto meno ricche di quelle contenute negli autostati. Discuterò in maggiore dettaglio questo punto nel prossimo paragrafo.
- Il significato delle funzioni d'onda di singola particella $\phi_i^{\text{KS}}(\mathbf{r})$ non hanno un significato fisico determinato ma sono da considerarsi uno strumento fisico per poter ottenere la densità. Anche gli autovalori ϵ_i non sono energie di singola particella come vengono definite dal teorema di Koopman.
- Non ci sono prescrizioni per la definizione del termine di scambio e correlazione. Gran parte del lavoro teorico nell'ambito della DFT è legato alla costruzione di questo termine.
- La DFT è un modello a particelle indipendenti

6.5 Densità e funzioni d'onda di singola particella

In questo paragrafo discuterò delle definizioni di densità e di funzioni d'onda di singola particella vista la loro importanza nella teoria di Hartree-Fock e della DFT.

Voglio definire la densità nella forma più generale possibile, in modo che non dipenda da alcun modello. Definiamo la matrice densità di un sistema a multicorpi come

$$\rho(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}'_1) = \frac{A}{\langle \Psi | \Psi \rangle} \int d^3r_2 d^3r_3 \cdots d^3r_A \Psi^*(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \cdots, \mathbf{r}_A) \Psi(\mathbf{r}'_1, \mathbf{r}_2, \cdots, \mathbf{r}_A) \quad (6.68)$$

dove Ψ indica la funzione d'onda che descrive il sistema. Per essere precisi, questa è la definizione della matrice della densità ad un corpo, poiché nell'equazione (6.68) vengono integrate tutte le coordinate tranne una. La matrice densità (6.68) è normalizzata al numero di particelle A , come si può vedere integrando sulle variabili \mathbf{r} e \mathbf{r}' e inserendo $\delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}')$. Le densità utilizzate nella DFT sono la parte diagonale della matrice densità. È evidente che integrando su $A-1$ coordinate si perda molta dell'informazione contenuta nella funzione d'onda Ψ . Questo limite diventa evidente quando si descrivono osservabili che sono sensibili non solo alla parte diagonale della matrice densità, come avviene nella DFT, ma anche ai termini fuori dalla diagonale.

Nel modello a particelle indipendenti lo stato $|\Psi\rangle$ è un determinante di Slater $|\Phi\rangle$ composto da un insieme di funzioni d'onda ortonormali di singola particella $|\phi_i\rangle$. Inserendo nell'equazione (6.68) il determinante di Slater si ottiene una matrice densità data da

$$\rho^{\text{IPM}}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}'_1) = \sum_{i \leq \epsilon_F} \phi_i^*(\mathbf{r}) \phi_i(\mathbf{r}') \quad (6.69)$$

Le **funzioni d'onda di campo medio** sono quelle generate in un modello a particelle indipendenti che generano una densità del tipo (6.69).

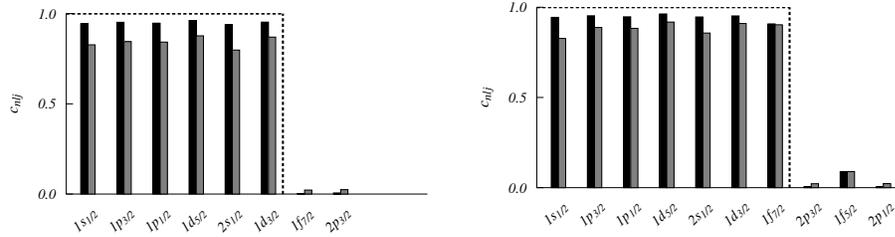


Figura 6.3: Confronto tra i numeri di occupazione del modello a particelle indipendenti, linee tratteggiate, e orbite naturali, linee degli istogrammi calcolati con due differenti correlazioni. Il sistema studiato è il nucleo ^{48}Ca . La figura a sinistra indica il risultato per i protoni, e quella a destra per i neutroni.

Le **orbite naturali** sono definite come quelle funzioni d'onda di singola particella che diagonalizzano la matrice densità (6.68) che può essere descritta come

$$\rho(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}'_1) = \sum_{\alpha} c_{\alpha} \phi_{\alpha}^{*\text{NO}}(\mathbf{r}) \phi_{\alpha}^{\text{NO}}(\mathbf{r}') \quad (6.70)$$

La differenza tra le espressioni (6.69) e (6.5) consiste nel fatto che nella seconda espressione la somma è estesa fino all'infinito i coefficienti, reali, c_{α} sono i termini diagonali della densità e indicano la percentuale di occupazione della singola orbita naturale. Le due densità sono normalizzate in modo che

$$A = \int d^3r \rho^{\text{IPM}}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}'_1) \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = \int d^3r \rho^{\text{NO}}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}'_1) \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = \sum_{\alpha} c_{\alpha} . \quad (6.71)$$

Questo permette di interpretare l'espressione (6.69) in analogia alla (6.5) nella quale i numeri di occupazione valgono 1 per gli stati sotto la superficie di Fermi, e 0 in alternativa.

Nella Fig. confronto i risultati del modello a particelle indipendenti con quello di un calcolo microscopico eseguito con due diverse funzioni di correlazione. Il sistema studiato è il nucleo ^{48}Ca e la figura a sinistra si riferisce ai protoni, mentre quella a destra ai neutroni.

Come si vede il modello a particelle indipendenti prevede occupazione completa degli stati al di sotto della superficie di Fermi, mentre al di sopra l'occupazione è nulla. I calcoli che includono le correlazioni mostrano che le orbite naturali sono solo parzialmente occupate sotto la superficie di Fermi, nonostante i numeri di occupazione siano vicino ad 1. Al di sopra della superficie di Fermi i numeri di occupazione sono relativamente piccoli, ma non nulli.

Nella figura (6.4) confronto alcune funzioni d'onda del modello a particelle indipendenti con le orbite naturali di neutroni nel ^{48}Ca . Si può osservare che la grande somiglianza tra orbite naturali e funzioni d'onda di singola particella. Il ruolo di effetti al di là del campo medio è consiste soprattutto nella modifica dei numeri di occupazione.

Un altro tipo di funzioni d'onda che si riferiscono al fermione individuale sono le **funzioni d'onda di quasi-particella** definite come la sovrapposizione delle funzioni d'onda di sistemi con A e $A-1$ particelle

$$\psi_\alpha(\mathbf{r}) = \frac{\sqrt{A}\langle\Psi(A-1)|\delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}_A)|\Psi(A)\rangle}{\langle\Psi(A-1)|\Psi(A-1)\rangle^{1/2}\langle\Psi(A)|\Psi(A)\rangle^{1/2}} \quad (6.72)$$

Nella figura (6.5) mostro la differenza tra le distribuzioni di carica dei nuclei ^{206}Pb e ^{205}Tl . La struttura a strati di questi due nuclei indica che la differenza tra le due distribuzioni di carica è dovuta all'assenza di un protone nello stato $3s_{1/2}$.

La linea identificata con IPM indica il modulo quadro di questa funzione d'onda di singola particella nel modello a particelle indipendenti. Si può osservare che la forma della funzione d'onda è molto simile a quella indicata dall'esperimento. D'altra parte si vede che la curva IPM è molto più grande. Per poter descrivere correttamente la distribuzione di carica è necessario inserire vari effetti che tengono conto del fatto che nel ^{206}Pb i neutroni non riempiono completamente tutti i livelli, IPM*, della vibrazioni superficiali collettive dei nuclei, LRC, e, infine, del fatto che l'interazione tra due nucleoni ha un core fortemente repulsivo, SRC. Tutti questi fenomeni non sono considerati nel modello a particelle indipendenti e sono inclusi nella generica categoria delle *correlazioni*.

È evidente che nel modello a particelle indipendenti funzioni d'onda di particelle indipendenti, orbite naturali e funzioni d'onda di quasi-particella coincidono. Le sottili differenze tra

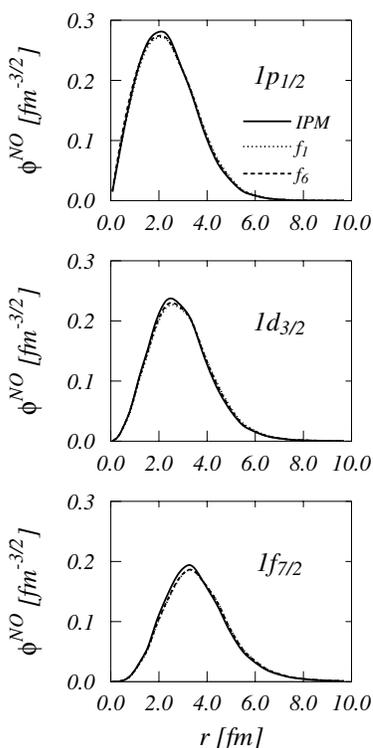
Figura 6.4: Funzioni d'onda di singola particella, linee continue, e orbite naturali per tre stati neutronici del ^{48}Ca .

questi tre tipi di funzioni d'onda emergono solo in casi molto particolari. Questo è ciò che rende molto utili i modelli a particelle indipendenti e la DFT. Nell'ambito di quest'ultima teoria posso affermare che l'effetto delle correlazioni è visibile in osservabili che sono sensibili alla parte non diagonale della matrice densità 6.68.

Un osservabile di questo tipo è la densità di momento, tradizionalmente indicata come $n(\mathbf{k})$, e definita come

$$n(\mathbf{k}) = \frac{1}{(2\pi)^3} \frac{1}{\langle\Psi|\Psi\rangle} \int d^3r e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{r}-\mathbf{r}')} \rho(\mathbf{r}, \mathbf{r}') . \quad (6.73)$$

La densità di momento è, nello spazio dei momenti, analoga alla densità di numero, risponde alla domanda di quale sia la probabilità di trovare nel sistema una particella con il valore del momento compreso tra k e



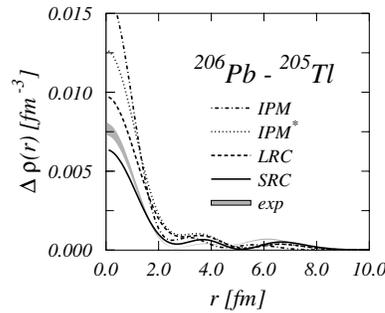


Figura 6.5: Differenza tra distribuzioni di carica dei nuclei ^{206}Pb e ^{205}Tl . IPM indica il risultato ottenuto con funzioni d'onda di campo medio. Le altre linee sono ottenute considerando correlazioni di vario tipo, a lungo e corto raggio, LRC e SRC rispettivamente.

$k + dk$. Nella figura 6.6 mostro le densità di momento per cinque nuclei sferici, e doppio magici. Le linee continue sono state ottenute considerando un modello a particelle indipendenti, ovvero con una matrice densità diagonale. Le altre linee sono ottenute nella teoria della funzione di base correlata (Correlated Basis Function, CBF) che risolve l'equazione di Schrödinger considerando correlazioni tra i nucleoni.

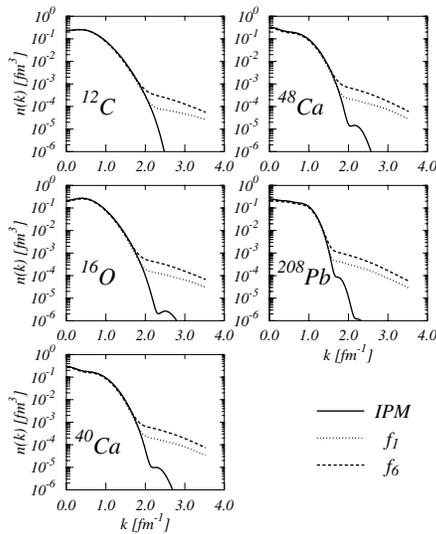


Figura 6.6: Distribuzioni di momento per cinque nuclei sferici e doppio magici ottenute nel modello a particelle indipendenti, IPM, e con una teoria che considera le correlazioni tra le particelle.

Capitolo 7

Funzioni di Green

Il formalismo presentato nei capitoli precedenti era finalizzato ad ottenere l'equazione di Goldstone (4.7) e alla sua applicazione al calcolo dell'energia dello stato fondamentale del sistema di fermioni interagenti. In questa presentazione ho volutamente evitato di utilizzare quell'entità nota come funzione di Green.

In realtà la funzione di Green è estremamente utile nella descrizione dei sistemi a molti corpi per il calcolo di quantità osservabili anche diverse dall'energia. Il calcolo delle funzioni di Green implica aspetti generali legati al problema a molti corpi, indipendentemente dallo specifico osservabile a cui si è interessati.

La funzione di Green non è definita in maniera univoca, perché la sua definizione dipende dal numero di operatori di campo considerati. In questo capitolo presenterò prima la funzione di Green ad un corpo, ne fornirò l'interpretazione fisica, la utilizzerò per calcolare osservabili, e presenterò la relazione con la funzione di Green definita come risolvente di equazioni differenziali. In seguito definirò la funzione di Green a due corpi. Il capitolo termina presentando un sistema di equazioni che collega le funzioni di Green a n corpi. La difficoltà di risolvere questo sistema di equazioni accoppiate spinge a formulare una tecnica alternativa per il calcolo delle funzioni di Green, tecnica basata sulla teoria perturbativa. Questo sarà il soggetto del capitolo successivo.

7.1 Funzioni di Green ad un corpo

L'operatore di campo fermionico in rappresentazione di Heisenberg è definito come

$$\psi_{H,\alpha}(\mathbf{x}, t) = e^{i\frac{H}{\hbar}t}\psi_{\alpha}(\mathbf{x})e^{-i\frac{H}{\hbar}t} \quad (7.1)$$

Nell'equazione precedente il subindice H indica Heisenberg, mentre, a destra del segno di uguaglianza, il simbolo H rappresenta l'hamiltoniana totale del sistema. Con α ho indicato tutti i numeri quantici, diversi da posizione e tempo, che caratterizzano la particella, ad esempio spin, isospin, colore ecc.

La **funzione di Green ad un corpo** per un sistema di fermioni è definita come

$$iG_{\alpha\beta}(\mathbf{x}, t, \mathbf{x}', t') = \frac{\langle \Psi_0 | T [\psi_{H,\alpha}(\mathbf{x}, t) \psi_{H,\beta}^{\dagger}(\mathbf{x}', t')] | \Psi_0 \rangle}{\langle \Psi_0 | \Psi_0 \rangle} \quad (7.2)$$

Nell'equazione precedente $|\Psi_0\rangle$ è lo stato fondamentale del sistema in rappresentazione di Heisenberg

$$H|\Psi_0\rangle = E|\Psi_0\rangle \quad (7.3)$$

e T indica l'operatore di ordinamento temporale

$$T \left[\psi_{H,\alpha}(\mathbf{x}, t) \psi_{H,\beta}^+(\mathbf{x}', t') \right] = \begin{cases} \psi_{H,\alpha}(\mathbf{x}, t) \psi_{H,\beta}^+(\mathbf{x}', t') & t > t' \\ - \psi_{H,\beta}^+(\mathbf{x}', t') \psi_{H,\alpha}(\mathbf{x}, t) & t < t' \end{cases} \quad (7.4)$$

Si possono legare le funzioni di Green ad un corpo alle seguenti quantità osservabili:

- valore di aspettazione di un operatore ad un corpo nello stato fondamentale del sistema,
- energia dello stato fondamentale,
- spettro di eccitazione del sistema per eccitazioni particella singola.

Per semplificare la scrittura d'ora in poi non scriverò esplicitamente i numeri quantici α e β , intendendo la loro somma ogni volta che indicherò l'integrale sulle coordinate. Inoltre, sempre per semplificare la scrittura, utilizzerò le unità naturali $\hbar = c = 1$.

Facendo l'ipotesi che l'hamiltoniana H sia indipendente dal tempo, possiamo scrivere la funzione di Green (7.2) come

$$i G(\mathbf{x}, t, \mathbf{x}', t') = \begin{cases} e^{iE(t-t')} \frac{\langle \Psi_0 | \psi(\mathbf{x}) e^{-iH(t-t')} \psi^+(\mathbf{x}') | \Psi_0 \rangle}{\langle \Psi_0 | \Psi_0 \rangle} & t > t' \\ - e^{-iE(t-t')} \frac{\langle \Psi_0 | \psi^+(\mathbf{x}') e^{iH(t-t')} \psi(\mathbf{x}) | \Psi_0 \rangle}{\langle \Psi_0 | \Psi_0 \rangle} & t < t' \end{cases} \quad (7.5)$$

Per calcolare il valore di aspettazione di un operatore ad un corpo nello stato fondamentale del sistema, utilizziamo la definizione di operatore ad un corpo

$$\mathcal{O}^I = \int d^3x \psi^+(\mathbf{x}) \mathcal{O}(\mathbf{x}) \psi(\mathbf{x}) \quad (7.6)$$

Possiamo scrivere il suo valore di aspettazione rispetto allo stato fondamentale come

$$\langle \mathcal{O}^I \rangle = \int d^3x \frac{\langle \Psi_0 | \psi^+(\mathbf{x}) \mathcal{O}(\mathbf{x}) \psi(\mathbf{x}) | \Psi_0 \rangle}{\langle \Psi_0 | \Psi_0 \rangle} = \int d^3x \lim_{\mathbf{x}' \rightarrow \mathbf{x}} \mathcal{O}(\mathbf{x}) \frac{\langle \Psi_0 | \psi^+(\mathbf{x}') \psi(\mathbf{x}) | \Psi_0 \rangle}{\langle \Psi_0 | \Psi_0 \rangle} \quad (7.7)$$

dove il limite $\mathbf{x}' \rightarrow \mathbf{x}$ è stato utilizzato per far commutare $\mathcal{O}(\mathbf{x})$ con $\psi^+(\mathbf{x})$. Utilizzando la seconda delle equazioni (7.5) ed indicando con t^+ un tempo maggiore di t otteniamo

$$\langle \mathcal{O}^I \rangle = -i \lim_{t' = t^+ \rightarrow t} \int d^3x \lim_{\mathbf{x} \rightarrow \mathbf{x}'} \mathcal{O}(\mathbf{x}) G(\mathbf{x}, t, \mathbf{x}', t^+) \quad (7.8)$$

Faccio un esempio con l'operatore densità. Il numero di particelle può essere scritto in funzione della densità come

$$\mathcal{N} \equiv \int d^3x \psi^+(\mathbf{x}) \rho(\mathbf{x}) \psi(\mathbf{x}) = \int d^3x \psi^+(\mathbf{x}) \psi(\mathbf{x}) \quad (7.9)$$

$$\begin{aligned} \langle \mathcal{N} \rangle &= -i \lim_{t' = t^+ \rightarrow t} \int d^3x \lim_{\mathbf{x} \rightarrow \mathbf{x}'} \rho(\mathbf{x}) G(\mathbf{x}, t, \mathbf{x}', t^+) \\ &= -i \lim_{t' = t^+ \rightarrow t} \int d^3x \lim_{\mathbf{x} \rightarrow \mathbf{x}'} G(\mathbf{x}, t, \mathbf{x}', t^+) \\ &= -i \int d^3x G(\mathbf{x}, t, \mathbf{x}, t) = \int d^3x \frac{\langle \Psi_0 | \psi^+(\mathbf{x}) \psi(\mathbf{x}) | \Psi_0 \rangle}{\langle \Psi_0 | \Psi_0 \rangle} \end{aligned} \quad (7.10)$$

Nel caso di fermioni non interagenti, cioè $|\Psi_0\rangle = |\Phi_0\rangle$, abbiamo

$$\langle \mathcal{N} \rangle = \int d^3x \frac{\langle \Phi_0 | \psi^\dagger(\mathbf{x}) \psi(\mathbf{x}) | \Phi_0 \rangle}{\langle \Phi_0 | \Phi_0 \rangle} \quad (7.11)$$

Usando la rappresentazione degli operatori di campo in termini di operatori di creazione e di distruzione, eq. (2.50) e (2.51), otteniamo

$$\begin{aligned} \langle \mathcal{N} \rangle &= \int d^3x \sum_{\alpha, \alpha'} \phi_\alpha^*(\mathbf{x}) \phi_{\alpha'}(\mathbf{x}) \langle \Phi_0 | a_\alpha^\dagger a_{\alpha'} | \Phi_0 \rangle \\ &= \int d^3x \sum_{\alpha, \alpha'=1}^{\epsilon_F} \phi_\alpha^*(\mathbf{x}) \phi_{\alpha'}(\mathbf{x}) \delta_{\alpha, \alpha'} = \int d^3x \sum_{\alpha=1}^{\epsilon_F} |\phi_\alpha(x)|^2 \end{aligned} \quad (7.12)$$

dove ho ipotizzato $|\Phi_0\rangle$ normalizzato ad uno e l'ortonormalità delle funzioni di singola particella ϕ_α , e ho indicato con ϵ_F l'energia di Fermi. L'espressione finale sotto il segno di integrazione è la tradizionale densità di un sistema di particelle non interagenti.

Calcolo adesso l'energia dello stato fondamentale del sistema, mostrando che può essere descritta in termini della sola funzione di Green ad un corpo.

Utilizzerò le seguenti espressioni dei commutatori di 3 operatori:

$$[A, BC] = ABC - BCA = ABC - BCA + BAC - BAC \quad (7.13)$$

$$[A, BC] = \{A, B\}C - B\{A, C\} \quad (7.14)$$

$$[A, BC] = [A, B]C - B[C, A] \quad (7.15)$$

e anche

$$\{A, BC\} = \{A, B\}C - B\{A, C\} \quad (7.16)$$

Consideriamo il commutatore dell'hamiltoniana

$$\begin{aligned} H &= T + V = \int d^3x \psi^\dagger(\mathbf{x}) \left(-\frac{\nabla_{\mathbf{x}}^2}{2m} \right) \psi(\mathbf{x}) \\ &+ \frac{1}{2} \int d^3x d^3y \psi^\dagger(\mathbf{x}) \psi^\dagger(\mathbf{y}) V(\mathbf{x}, \mathbf{y}) \psi(\mathbf{y}) \psi(\mathbf{x}) \end{aligned} \quad (7.17)$$

con l'operatore $\psi(\mathbf{r})$. Calcoliamo il commutatore con il termine di energia cinetica

$$[\psi(\mathbf{r}), T] = \left[\underbrace{\psi(\mathbf{r})}_A, \int d^3x \underbrace{\psi^\dagger(\mathbf{x}) \left(-\frac{\nabla_{\mathbf{x}}^2}{2m} \right) \psi(\mathbf{x})}_C \right] \quad (7.18)$$

Applico l'equazione (7.14)

$$\begin{aligned} [\psi(\mathbf{r}), T] &= \int d^3x \underbrace{\{\psi(\mathbf{r}), \psi^\dagger(\mathbf{x})\}}_{\delta(\mathbf{x}-\mathbf{r})} \left(-\frac{\nabla_{\mathbf{x}}^2}{2m} \psi(\mathbf{x}) \right) - \int d^3x \psi^\dagger(\mathbf{x}) \left(-\frac{\nabla_{\mathbf{x}}^2}{2m} \right) \underbrace{\{\psi(\mathbf{r}), \psi(\mathbf{x})\}}_0 \\ &= \int d^3x \delta(\mathbf{x} - \mathbf{r}) \left(-\frac{\nabla_{\mathbf{x}}^2}{2m} \psi(\mathbf{x}) \right) = -\frac{\nabla_{\mathbf{r}}^2}{2m} \psi(\mathbf{r}) \end{aligned} \quad (7.19)$$

Per il termine di interazione

$$[\psi(\mathbf{r}), V] = \frac{1}{2} \int d^3x d^3y \left[\underbrace{\psi(\mathbf{r})}_A, \underbrace{\psi^+(\mathbf{x})}_B \underbrace{\psi^+(\mathbf{y})V(\mathbf{x}, \mathbf{y})\psi(\mathbf{y})\psi(\mathbf{x})}_C \right] \quad (7.20)$$

Applico l'equazione (7.14)

$$\begin{aligned} [\psi(\mathbf{r}), V] &= \frac{1}{2} \int d^3x d^3y \left[\underbrace{\{\psi(\mathbf{r}), \psi^+(\mathbf{x})\}}_{\delta(\mathbf{r}-\mathbf{x})} C - \psi^+(\mathbf{x}) \left\{ \underbrace{\psi(\mathbf{r})}_{A'} \underbrace{\psi^+(\mathbf{y})}_{B'} \underbrace{V(\mathbf{x}, \mathbf{y})\psi(\mathbf{y})\psi(\mathbf{x})}_{C'} \right\} \right] \\ &= \frac{1}{2} \int d^3y \psi^+(\mathbf{y}) V(\mathbf{r}, \mathbf{y}) \psi(\mathbf{y}) \psi(\mathbf{r}) \\ &+ \frac{1}{2} \int d^3x d^3y (-\psi^+(\mathbf{x})) \underbrace{\{\psi(\mathbf{r}), \psi^+(\mathbf{x})\}}_{\delta(\mathbf{r}-\mathbf{y})} V(\mathbf{x}, \mathbf{y}) \underbrace{\psi(\mathbf{y})\psi(\mathbf{x})}_{-\psi(\mathbf{x})\psi(\mathbf{y})} \\ &+ -\frac{1}{2} \int d^3x d^3y (-\psi^+(\mathbf{x})) \psi^+(\mathbf{y}) V(\mathbf{x}, \mathbf{y}) \underbrace{[\psi(\mathbf{r}), \psi(\mathbf{y})\psi(\mathbf{x})]}_0 \\ &= \frac{1}{2} \int d^3y \psi^+(\mathbf{y}) V(\mathbf{r}, \mathbf{y}) \psi(\mathbf{y}) \psi(\mathbf{r}) + \frac{1}{2} \int d^3x \psi^+(\mathbf{x}) V(\mathbf{x}, \mathbf{r}) \psi(\mathbf{x}) \psi(\mathbf{r}) \end{aligned} \quad (7.21)$$

dove ho utilizzato la (7.16) e le regole di (anti)commutazione di operatori di campo. Per la simmetria del potenziale, $V(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = V(\mathbf{y}, \mathbf{x})$, i due termini dell'ultima espressione sono uguali, quindi

$$[\psi(\mathbf{r}), V] = \int d^3x \psi^+(\mathbf{x}) V(\mathbf{r}, \mathbf{x}) \psi(\mathbf{x}) \psi(\mathbf{r}) \quad (7.22)$$

Unendo le (7.19) e (7.22) ottengo

$$[\psi(\mathbf{r}), H] = -\frac{\nabla_{\mathbf{r}}^2}{2m} \psi(\mathbf{r}) + \int d^3x \psi^+(\mathbf{x}) V(\mathbf{r}, \mathbf{x}) \psi(\mathbf{x}) \psi(\mathbf{r}) \quad (7.23)$$

Uso questa equazione nell'equazione del moto per l'operatore di campo in rappresentazione di Heisenberg

$$\begin{aligned} i \frac{\partial}{\partial t} \psi_{\mathbf{H}}(\mathbf{r}, t) &= [\psi_{\mathbf{H}}(\mathbf{r}, t), H] = e^{iHt} [\psi(\mathbf{r}), H] e^{-iHt} \\ &= -\frac{\nabla_{\mathbf{r}}^2}{2m} \psi_{\mathbf{H}}(\mathbf{r}, t) + \int d^3x \psi_{\mathbf{H}}^+(\mathbf{x}, t) V(\mathbf{r}, \mathbf{x}) \psi_{\mathbf{H}}(\mathbf{x}, t) \psi_{\mathbf{H}}(\mathbf{r}, t) \end{aligned} \quad (7.24)$$

Moltiplico a sinistra per l'operatore $\psi_{\mathbf{H}}^\dagger(\mathbf{r}', t')$ e poi calcolo il valore di aspettazione sullo stato fondamentale $|\Psi_0\rangle$ e divido per la sua norma.

$$\begin{aligned} &\left[i \frac{\partial}{\partial t} - \left(-\frac{\nabla_{\mathbf{r}}^2}{2m} \right) \right] \frac{\langle \Psi_0 | \psi_{\mathbf{H}}^\dagger(\mathbf{r}', t') \psi_{\mathbf{H}}(\mathbf{r}, t) | \Psi_0 \rangle}{\langle \Psi_0 | \Psi_0 \rangle} \\ &= \frac{1}{\langle \Psi_0 | \Psi_0 \rangle} \int d^3x \langle \Psi_0 | \psi_{\mathbf{H}}^\dagger(\mathbf{r}', t') \psi_{\mathbf{H}}^\dagger(\mathbf{x}, t) V(\mathbf{r}, \mathbf{x}) \psi_{\mathbf{H}}(\mathbf{x}, t) \psi_{\mathbf{H}}(\mathbf{r}, t) | \Psi_0 \rangle \end{aligned} \quad (7.25)$$

Considero il limite per $\mathbf{r}' \rightarrow \mathbf{r}$ e $t' \rightarrow t$ e, poi, integro su d^3r ,

$$\int d^3r \lim_{\mathbf{r}' \rightarrow \mathbf{r}} \lim_{t' \rightarrow t} \left[i \frac{\partial}{\partial t} - \left(-\frac{\nabla_{\mathbf{r}}^2}{2m} \right) \right] [-iG(\mathbf{r}, t, \mathbf{r}', t')] = 2 \langle \Psi_0 | V | \Psi_0 \rangle \quad (7.26)$$

dove il termine 2 è legato alla definizione di V data dalla (7.17). Con l'aiuto di questa equazione si può eliminare il termine di potenziale dal valore di aspettazione dell'energia.

$$\begin{aligned} E_0 &= \langle \Psi_0 | T | \Psi_0 \rangle + \langle \Psi_0 | V | \Psi_0 \rangle \\ &= -\frac{i}{2} \int d^3r \lim_{\mathbf{r}' \rightarrow \mathbf{r}} \lim_{t' \rightarrow t} \left[i \frac{\partial}{\partial t} + \left(-\frac{\nabla_{\mathbf{r}}^2}{2m} \right) \right] G(\mathbf{r}, t, \mathbf{r}', t') \end{aligned} \quad (7.27)$$

Questa espressione indica come sia possibile descrivere l'energia dello stato fondamentale del sistema interagente in termini di sola funzione di Green ad un corpo.

7.1.1 Sistema di fermioni non interagenti

In questo paragrafo otterrò un'espressione della funzione di Green ad un corpo per un sistema infinito di fermioni non interagenti. Questo risultato è la base per il calcolo perturbativo della funzione di Green per il sistema interagente.

Nel caso non interagente abbiamo

$$H \equiv H_0 = \sum_{\alpha} h_{\alpha} \quad (7.28)$$

dove h_{α} sono hamiltoniane di singola particella di cui le ϕ_{α} sono autostati. In questo caso, tutti gli operatori in rappresentazione di Heisenberg corrispondono a quelli scritti in rappresentazione di interazione

$$\mathcal{O}_H \equiv e^{iHt} \mathcal{O} e^{-iHt} = e^{iH_0 t} \mathcal{O} e^{-iH_0 t} \equiv \mathcal{O}_I \quad (7.29)$$

Consideriamo normalizzati ad uno gli stati $|\Phi_0\rangle$ del sistema non interagente. Per definizione, la funzione di Green assume l'espressione

$$\begin{aligned} i G^0(\mathbf{x}, t, \mathbf{x}', t') &= \langle \Phi_0 | T [\psi_I(\mathbf{x}, t) \psi_I^{\dagger}(\mathbf{x}', t')] | \Phi_0 \rangle \\ &= \langle \Phi_0 | \psi_I(\mathbf{x}, t) \psi_I^{\dagger}(\mathbf{x}', t') | \Phi_0 \rangle \Theta(t - t') - \langle \Phi_0 | \psi_I^{\dagger}(\mathbf{x}', t') \psi_I(\mathbf{x}, t) | \Phi_0 \rangle \Theta(t' - t) \end{aligned} \quad (7.30)$$

dove ho indicato con $\Theta(x)$ la funzione gradino.

Consideriamo gli operatori di campo in rappresentazione di interazione esprimendoli in termini di operatori di creazione e distruzione

$$\psi_I(\mathbf{x}, t) = \sum_k a_k(t) \phi_k(\mathbf{x}) \quad \text{e} \quad \psi_I^{\dagger}(\mathbf{x}, t) = \sum_k a_k^{\dagger}(t) \phi_k^*(\mathbf{x}) \quad (7.31)$$

quindi

$$\begin{aligned} i G^0(\mathbf{x}, t, \mathbf{x}', t') &= \langle \Phi_0 | \sum_k \phi_k(\mathbf{x}) a_k e^{-i\omega_k t} \sum_{k'} \phi_{k'}^*(\mathbf{x}') a_{k'}^{\dagger} e^{i\omega_{k'} t'} | \Phi_0 \rangle \Theta(t - t') \\ &\quad - \langle \Phi_0 | \sum_{k'} \phi_{k'}^*(\mathbf{x}') a_{k'}^{\dagger} e^{i\omega_{k'} t'} \sum_k \phi_k(\mathbf{x}) a_k e^{-i\omega_k t} | \Phi_0 \rangle \Theta(t' - t) \\ &= \sum_{k k'} \phi_k(\mathbf{x}) \phi_{k'}^*(\mathbf{x}') e^{-i\omega_k t} e^{i\omega_{k'} t'} \\ &\quad [\langle \Phi_0 | a_k a_{k'}^{\dagger} | \Phi_0 \rangle \Theta(t - t') - \langle \Phi_0 | a_{k'}^{\dagger} a_k | \Phi_0 \rangle \Theta(t' - t)] \end{aligned} \quad (7.32)$$

Per definizione di $|\Phi_0\rangle$ abbiamo che

$$\langle \Phi_0 | a_k a_{k'}^{\dagger} | \Phi_0 \rangle = \delta_{k k'} \Theta(k' - k_F), \quad \text{e} \quad \langle \Phi_0 | a_{k'}^{\dagger} a_k | \Phi_0 \rangle = \delta_{k k'} \Theta(k_F - k) \quad (7.33)$$

In un sistema infinito

$$\phi_k(\mathbf{x}) = \frac{1}{\sqrt{\Omega}} e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}} \quad (7.34)$$

dove Ω è un volume finito che si farà tendere all'infinito al termine dei calcoli. La funzione di Green imperturbata (7.32) assume l'espressione

$$iG^0(\mathbf{x}, t, \mathbf{x}', t') = \frac{1}{\Omega} \sum_k e^{-i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{x}-\mathbf{x}')} e^{-i\omega_k(t-t')} [\Theta(k - k_F)\Theta(t - t') - \Theta(k_F - k)\Theta(t' - t)] \quad (7.35)$$

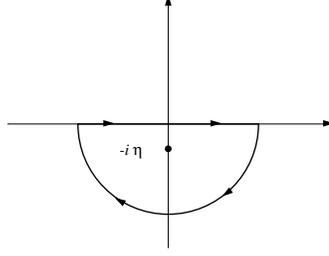


Figura 7.1: Contorno di integrazione per l'integrale (7.39)

Per un sistema infinito bisogna considerare la corrispondenza

$$\sum_k \rightarrow \frac{\Omega}{(2\pi)^3} \int d^3 k \quad (7.36)$$

Utilizzando la rappresentazione integrale della funzione gradino

$$\Theta(x) = - \lim_{\eta \rightarrow 0} \int_{-\infty}^{\infty} dk \frac{1}{2\pi i} \frac{e^{-ikx}}{k + i\eta} \quad (7.37)$$

posso scrivere

$$iG^0(\mathbf{x}, t, \mathbf{x}', t') = \frac{1}{(2\pi)^3} \int d^3 k e^{-i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{x}-\mathbf{x}')} e^{-i\omega_k(t-t')} \left[- \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega'}{2\pi i} \frac{e^{-i\omega'(t-t')}}{\omega' + i\eta} \Theta(k - k_F) - \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega'}{2\pi i} \frac{e^{-i\omega'(t-t')}}{\omega' - i\eta} \Theta(k_F - k) \right] \quad (7.38)$$

Calcoliamo l'integrale dell'equazione (7.37) utilizzando il teorema dei residui

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx \frac{1}{2\pi i} \frac{e^{-ikx}}{k + i\eta} = - \lim_{\eta \rightarrow 0} 2\pi i \frac{1}{2\pi i} (k + i\eta) \frac{e^{-ikx}}{k + i\eta} = -e^{-\eta x} \quad (7.39)$$

dove il segno $-$ è legato alla direzione del circuito di integrazione per $x > 0$. Nel caso di $x < 0$ il circuito di integrazione sarebbe chiuso senza contenere il polo, quindi l'integrale sarebbe nullo. A questo punto si ha che

$$\lim_{\eta \rightarrow 0} -e^{-\eta x} = -1 \quad (7.40)$$

da cui la (7.37) .

Raggruppando e moltiplicando per $-i$ ottengo

$$G^0(\mathbf{x}, t, \mathbf{x}', t') = \frac{1}{(2\pi)^4} \int d^3k e^{-i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{x}-\mathbf{x}')} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega' e^{-i\omega'(t-t')} e^{-i\omega_k(t-t')} \left[\frac{\Theta(k - k_F)}{\omega' + i\eta} + \frac{\Theta(k_F - k)}{\omega' - i\eta} \right] \quad (7.41)$$

Definendo una nuova variabile $\omega = \omega' + \omega_k$ posso riscrivere l'equazione precedente come

$$G^0(\mathbf{x}, t, \mathbf{x}', t') = \frac{1}{(2\pi)^4} \int d^3k e^{-i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{x}-\mathbf{x}')} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega e^{-i\omega(t-t')} \left[\frac{\Theta(k - k_F)}{\omega - \omega_k + i\eta} + \frac{\Theta(k_F - k)}{\omega - \omega_k - i\eta} \right] \quad (7.42)$$

dalla quale posso definire la funzione di Green imperturbata dipendente dall'impulso ed dall'energia

$$G^0(\mathbf{k}, \omega) \equiv \left[\frac{\Theta(k - k_F)}{\omega - \omega_k + i\eta} + \frac{\Theta(k_F - k)}{\omega - \omega_k - i\eta} \right] \quad (7.43)$$

7.1.2 Relazione con la risolvente dell'equazione di Schrödinger.

Consideriamo il caso $t > t'$ la definizione della funzione di Green non perturbata è

$$\begin{aligned} G^0(\mathbf{x}, t, \mathbf{x}', t') &= -i\Theta(t - t') \langle \Phi_0 | \psi_I(\mathbf{x}, t) \psi_I^\dagger(\mathbf{x}', t') | \Phi_0 \rangle \\ &= -i\Theta(t - t') \langle \Phi_0 | \sum_k \phi_k(\mathbf{x}) a_k e^{-i\omega_k t} \sum_{k'} \phi_{k'}^*(\mathbf{x}') a_{k'}^+ e^{i\omega_{k'} t'} | \Phi_0 \rangle \\ &= -i\Theta(t - t') \sum_{k, k'} \phi_k(\mathbf{x}) \phi_{k'}^*(\mathbf{x}') e^{-i\omega_k t} e^{i\omega_{k'} t'} \langle \Phi_0 | a_k a_{k'}^+ | \Phi_0 \rangle \end{aligned} \quad (7.44)$$

Per $|\Phi_0\rangle$ stato fondamentale di campo medio si ha che

$$\langle \Phi_0 | a_k a_{k'}^+ | \Phi_0 \rangle = \delta_{k, k'} \Theta(k' - k_F) \quad (7.45)$$

Facciamo l'ipotesi che

$$\sum_{k > k_F}^{\infty} \simeq \sum_k^{\infty} \quad (7.46)$$

quindi le somme in (7.44) si riducono ad un'unica somma su tutti gli stati di singola particella. Per la completezza dello spazio abbiamo che

$$\sum_k^{\infty} \phi_k(\mathbf{x}) \phi_k^*(\mathbf{x}') = \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \quad (7.47)$$

quindi

$$\lim_{t \rightarrow t'} G^0(\mathbf{x}, t, \mathbf{x}', t') = -i\delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \quad (7.48)$$

Sostituiamo l'espressione (7.44) nell'equazione di Schrödinger dipendente dal tempo

$$\begin{aligned} \left[i \frac{\partial}{\partial t} - H_o(\mathbf{x}) \right] G^0(\mathbf{x}, t, \mathbf{x}', t) &= \left[i \frac{\partial}{\partial t} - H_o(\mathbf{x}) \right] \left[-i\Theta(t - t') \sum_k \phi_k(\mathbf{x}, t) \phi_k^*(\mathbf{x}', t') \right] \\ &= \left[\frac{\partial}{\partial t} \Theta(t - t') \right] \sum_k \phi_k(\mathbf{x}, t) \phi_k^*(\mathbf{x}', t') + \sum_k \phi_k^*(\mathbf{x}', t') \underbrace{\left[i \frac{\partial}{\partial t} - H_o(\mathbf{x}) \right] \phi_k(\mathbf{x}, t)}_0 [-i\Theta(t - t')] \end{aligned} \quad (7.49)$$

Dato che per costruzione

$$\left[i \frac{\partial}{\partial t} - H_o(\mathbf{x}) \right] \phi_k(\mathbf{x}, t) = 0 \quad (7.50)$$

e che

$$\frac{\partial}{\partial \tau} \Theta(\tau) = \delta(\tau) \quad (7.51)$$

ottengo

$$\left[i \frac{\partial}{\partial t} - H_o(\mathbf{x}) \right] G^0(\mathbf{x}, t, \mathbf{x}', t') = \delta(t - t') \delta^3(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \quad (7.52)$$

quindi G^0 è la risolvante dell'equazione di Schrödinger di un sistema di particelle non interagenti.

7.1.3 Rappresentazione di Lehman

Consideriamo la funzione di Green completa e, per semplicità di scrittura, supponiamo che lo stato fondamentale dell'hamiltoniana sia normalizzato $\langle \Psi_0 | \Psi_0 \rangle = 1$. Riscriviamo l'espressione della funzione di Green inserendo un insieme completo di autostati dell'hamiltoniana

$$\begin{aligned} i G(\mathbf{x}, t, \mathbf{x}', t') &= \langle \Psi_0 | T [\psi_{\text{H}}(\mathbf{x}, t) \psi_{\text{H}}^{\dagger}(\mathbf{x}', t')] | \Psi_0 \rangle \\ &= \sum_n [\langle \Psi_0 | \psi_{\text{H}}(\mathbf{x}, t) | \Psi_n \rangle \langle \Psi_n | \psi_{\text{H}}^{\dagger}(\mathbf{x}', t') | \Psi_0 \rangle \Theta(t - t') \\ &\quad - \langle \Psi_0 | \psi_{\text{H}}^{\dagger}(\mathbf{x}', t') | \Psi_n \rangle \langle \Psi_n | \psi_{\text{H}}(\mathbf{x}, t) | \Psi_0 \rangle \Theta(t' - t)] \end{aligned} \quad (7.53)$$

Gli autostati $|\Psi_n\rangle$ contengono diversi numeri di particelle. Nello specifico, mentre quelli presenti nel termine con $\Theta(t - t')$ hanno $N+1$ particelle, quelli del termine con $\Theta(t' - t)$ hanno $N-1$ particelle.

Indico con N il numero di particelle autovalore dell'operatore numero di particelle

$$\mathcal{N} = \int d^3x \psi^{\dagger}(\mathbf{x}) \psi(\mathbf{x}) \quad (7.54)$$

Calcolo il commutatore

$$\begin{aligned} [\mathcal{N}, \psi(\mathbf{z})] &= \int d^3x [\psi^{\dagger}(\mathbf{x}) \psi(\mathbf{x}), \psi(\mathbf{z})] = \int d^3x [\psi^{\dagger}(\mathbf{x}) \psi(\mathbf{x}) \psi(\mathbf{z}) - \psi(\mathbf{z}) \psi^{\dagger}(\mathbf{x}) \psi(\mathbf{x})] \\ &= \int d^3x [\psi^{\dagger}(\mathbf{x}) \psi(\mathbf{x}) \psi(\mathbf{z}) - \psi^{\dagger}(\mathbf{x}) \psi(\mathbf{x}) \psi(\mathbf{z}) - \psi(\mathbf{z}) \delta(\mathbf{x} - \mathbf{z})] = -\psi(\mathbf{z}) \end{aligned}$$

Da punto di vista operatoriale posso scrivere

$$[\mathcal{N}, \psi] = -\psi, \quad \mathcal{N}\psi - \psi\mathcal{N} = -\psi, \quad \mathcal{N}\psi = \psi(\mathcal{N} - 1) \quad (7.55)$$

quindi

$$\mathcal{N}\psi|\Psi_0\rangle = \psi(\mathcal{N} - 1)|\Psi_0\rangle = \psi(N - 1)|\Psi_0\rangle = (N - 1)\psi|\Psi_0\rangle \quad (7.56)$$

che indica che gli stati del secondo termine dell'equazione (7.53) hanno una particella in meno degli stati $|\Psi_0\rangle$.

Esplicitiamo nell'equazione (7.53) gli operatori di campo in rappresentazione di Schrödinger

$$\mathcal{O}_H = e^{iHt} \mathcal{O}_S e^{-iHt} \quad (7.57)$$

$$\begin{aligned}
i G(\mathbf{x}, t, \mathbf{x}', t') &= \sum_n \left[\Theta(t-t') e^{-i(E_n - E_0)(t-t')} \langle \Psi_0 | \psi(\mathbf{x}) | \Psi_n \rangle \langle \Psi_n | \psi^+(\mathbf{x}') | \Psi_0 \rangle \right. \\
&\quad \left. - \Theta(t-t') e^{i(E_n - E_0)(t-t')} \langle \Psi_0 | \psi^+(\mathbf{x}') | \Psi_n \rangle \langle \Psi_n | \psi(\mathbf{x}) | \Psi_0 \rangle \right] \quad (7.58)
\end{aligned}$$

Sostituiamo le espressioni degli operatori di campo

$$\psi(\mathbf{x}) = \sum_k a_k \phi_k(\mathbf{x}) \quad \text{e} \quad \psi^+(\mathbf{x}) = \sum_k a_k^+ \phi_k^*(\mathbf{x}) \quad (7.59)$$

$$\begin{aligned}
i G(\mathbf{x}, t, \mathbf{x}', t') &= \sum_n \left[\Theta(t-t') e^{-i(E_n - E_0)(t-t')} \sum_{k, k'} \phi_k(\mathbf{x}) \phi_{k'}^*(\mathbf{x}') \langle \Psi_0 | a_k | \Psi_n \rangle \langle \Psi_n | a_{k'}^+ | \Psi_0 \rangle \right. \\
&\quad \left. - \Theta(t'-t) e^{i(E_n - E_0)(t-t')} \sum_{k, k'} \phi_k(\mathbf{x}) \phi_{k'}^*(\mathbf{x}') \langle \Psi_0 | a_{k'}^+ | \Psi_n \rangle \langle \Psi_n | a_k | \Psi_0 \rangle \right] \quad (7.60)
\end{aligned}$$

Considerando che, per un sistema infinito, sono valide la (7.34) e la (7.36) possiamo scrivere

$$\begin{aligned}
i G(\mathbf{x}, t, \mathbf{x}', t') &= \\
&\sum_n \left[\Theta(t-t') e^{-i(E_n - E_0)(t-t')} \frac{1}{(2\pi)^3} \int d^3 k e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{x} - \mathbf{x}')} \langle \Psi_0 | a_k | \Psi_n \rangle \langle \Psi_n | a_{k'}^+ | \Psi_0 \rangle \right. \\
&\quad \left. - \Theta(t'-t) e^{i(E_n - E_0)(t-t')} \frac{1}{(2\pi)^3} \int d^3 k e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{x} - \mathbf{x}')} \langle \Psi_0 | a_{k'}^+ | \Psi_n \rangle \langle \Psi_n | a_k | \Psi_0 \rangle \right] \quad (7.61)
\end{aligned}$$

Nelle espressioni precedenti abbiamo considerato che $|\Psi_n\rangle$ è caratterizzato dall'impulso k , quindi

$$I = \sum_n |\Psi_n\rangle \langle \Psi_n| = \frac{1}{(2\pi)^3} \int d^3 k |k\rangle \langle k'| = \delta_{k, k'}$$

Utilizziamo la rappresentazione integrale della funzione gradino (7.37)

$$\begin{aligned}
G(\mathbf{x}, t, \mathbf{x}', t') &= \frac{1}{(2\pi)^4} \int d^3 k e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{x} - \mathbf{x}')} \int d\omega e^{-i\omega(t-t')} \\
&\sum_n \left[\frac{\langle \Psi_0 | a_k | \Psi_n \rangle \langle \Psi_n | a_{k'}^+ | \Psi_0 \rangle}{\omega - (E_n - E_0) + i\eta} + \frac{\langle \Psi_0 | a_{k'}^+ | \Psi_n \rangle \langle \Psi_n | a_k | \Psi_0 \rangle}{\omega + (E_n - E_0) - i\eta} \right] \quad (7.62)
\end{aligned}$$

Possiamo definire la trasformata di Fourier

$$\begin{aligned}
G(\mathbf{k}, \omega) &= \int d^3(x-x') e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{x} - \mathbf{x}')} \int d(t-t') e^{-i\omega(t-t')} G(\mathbf{x}, t, \mathbf{x}', t') \\
&= \sum_n \left[\frac{\langle \Psi_0 | a_k | \Psi_n \rangle \langle \Psi_n | a_{k'}^+ | \Psi_0 \rangle}{\omega - (E_n - E_0) + i\eta} + \frac{\langle \Psi_0 | a_{k'}^+ | \Psi_n \rangle \langle \Psi_n | a_k | \Psi_0 \rangle}{\omega + (E_n - E_0) - i\eta} \right] \quad (7.63)
\end{aligned}$$

Analizzo il denominatore del primo termine. L'energia E_0 è autovalore di $|\Psi_0\rangle$ sistema con N particelle, mentre E_n è autovalore di $|\Psi_n\rangle$ che ha $N+1$ particelle. Riscrivo il denominatore esplicitando tra parentesi tonde il numero di particelle del sistema al quale si riferisce l'energia.

$$\begin{aligned}
\omega - E_n(N+1) + E_0(N) &= \omega - E_n(N+1) + E_0(N+1) - E_0(N+1) + E_0(N) \\
&= \omega - [E_n(N+1) - E_0(N+1)] - [E_0(N+1) - E_0(N)] = \omega - \omega_n(N+1) - \mu
\end{aligned}$$

Nell'equazione precedente ho definito con $\omega_n(N+1)$ l'energia di eccitazione del sistema con $N+1$ particelle e con μ il potenziale chimico definito come

$$\mu = \left(\frac{\partial E}{\partial N} \right)_V \equiv \left[\frac{E_0(N+1) - E_0(N)}{\Delta 1} \right] \quad (7.64)$$

dove ho indicato con $\Delta 1$ la variazione di una unità del numero di fermioni. La funzione di Green in rappresentazione Lehmann è quindi

$$G(\mathbf{k}, \omega) = \sum_n \left[\frac{\langle \Psi_0 | a_k | \Psi_n \rangle \langle \Psi_n | a_k^\dagger | \Psi_0 \rangle}{\omega - \omega_n - \mu + i\eta} + \frac{\langle \Psi_0 | a_k^\dagger | \Psi_n \rangle \langle \Psi_n | a_k | \Psi_0 \rangle}{\omega + \omega_n - \mu - i\eta} \right] \quad (7.65)$$

Il segno del potenziale chimico nel secondo denominatore è dovuto alla definizione (7.64) nella quale la derivata ha segno positivo aggiungendo una particella al sistema. È da notare che ω_n nel primo termine si riferisce all'eccitazione di un sistema con $N+1$ particelle, mentre nel secondo termine ad un sistema con $N-1$ particelle.

7.1.4 Interpretazione fisica

In rappresentazione di interazione, consideriamo uno stato ed aggiungiamo una particella nel punto \mathbf{x}' , al tempo t'

$$\psi_I^+(\mathbf{x}', t') | \Psi(t') \rangle \quad (7.66)$$

Questo stato si propaga al tempo t come

$$U(t, t') \psi_I^+(\mathbf{x}', t') | \Psi_I(t') \rangle \quad (7.67)$$

Cerchiamo la sua sovrapposizione con $\psi_I^+(\mathbf{x}, t) | \Psi_I(t) \rangle$ per $t > t'$. Ricordiamo alcune proprietà dell'operatore di propagazione $U(t, t')$

$$\begin{aligned} U(t, t') U(t', t) &= U(t, t) = 1 \\ | \Psi_H \rangle &= | \Psi_I(0) \rangle = U(0, -\infty) | \Phi_0 \rangle = | \Psi_0 \rangle \\ U(t, t_0) &= e^{iH_0 t} e^{-i(H_0 + H_1)(t-t_0)} e^{-iH_0 t_0} \\ U(t, 0) &= e^{-iH_1 t} ; \quad U(0, t) = e^{iH_1 t} \\ \mathcal{O}_I(t) &= e^{-iH_1 t} \mathcal{O}_H(t) e^{iH_1 t} = U(t, 0) \mathcal{O}_H U(0, t) \\ \mathcal{O}_H(t) &= e^{iH t} \mathcal{O}_S e^{-iH t} ; \quad \mathcal{O}_I(t) = e^{iH_0 t} \mathcal{O}_S e^{-iH_0 t} \\ | \Psi_I(t') \rangle &= U(t', -\infty) | \Phi(0) \rangle \end{aligned}$$

Possiamo scrivere la sovrapposizione tra due stati. Al tempo t' aggiungiamo una particella al sistema nel punto \mathbf{x}' , lo stato si propaga e, successivamente, al tempo t nella posizione \mathbf{x} viene tolta una particella.

$$\begin{aligned} \langle \Psi(t) | \psi_I(\mathbf{x}, t) U(t, t') \psi_I^+(\mathbf{x}', t') | \Psi(t') \rangle &= \\ \langle \Phi_0 | U(\infty, t) [U(t, 0) \psi_H(\mathbf{x}, t) U(0, t)] U(t, t') [U(t', 0) \psi_H^+(\mathbf{x}', t') U(0, t')] U(t', -\infty) | \Phi_0 \rangle &= \\ \{ \langle \Phi_0 | U(\infty, t) U(t, 0) \} \psi_H(\mathbf{x}, t) [U(0, t) U(t, t') U(t', 0)] \psi_H^+(\mathbf{x}', t') \{ U(0, t') U(t', -\infty) | \Phi_0 \rangle \} &= \\ \langle \Psi_0 | \psi_H(\mathbf{x}, t) \psi_H^+(\mathbf{x}', t') | \Psi_0 \rangle & \end{aligned}$$

L'ultima espressione è quella della funzione di Green ad un corpo per $t > t'$.

7.2 Funzione di Green a due corpi

Anche in questo paragrafo utilizzerò le unità naturali, $\hbar = c = 1$, ed, inoltre, per semplificare la scrittura, farò l'ipotesi $\langle \Psi_0 | \Psi_0 \rangle = 1$. La funzione di Green a due corpi è definita come

$$(-i)^2 G(\mathbf{x}_1, t_1, \mathbf{x}_2, t_2, \mathbf{x}_3, t_3, \mathbf{x}_4, t_4) \equiv \langle \Psi_0 | T[\psi_H(\mathbf{x}_1, t_1) \psi_H(\mathbf{x}_2, t_2) \psi_H^+(\mathbf{x}_3, t_3) \psi_H^+(\mathbf{x}_4, t_4)] | \Psi_0 \rangle \quad (7.68)$$

dove, come fatto in precedenza, ho indicato con $T[]$ l'operatore di ordinamento temporale. Se per la funzione di Green ad un corpo era necessario considerare due soli casi, $t > t'$ e viceversa, per la funzione di Green a due corpi i casi sono $4! = 24$. In realtà per le proprietà di simmetria

$$G(1234) = -G(2134) = -G(1243) = G(2143) \quad (7.69)$$

solo 6 casi sono indipendenti. Di questi solo tre casi hanno conseguenze fisicamente interessanti,

1. $t_1, t_2 > t_3, t_4$ che implica

$$(-i)^2 G(\mathbf{x}_1, t_1, \mathbf{x}_2, t_2, \mathbf{x}_3, t_3, \mathbf{x}_4, t_4) \equiv \langle \Psi_0 | \psi_H(\mathbf{x}_1, t_1) \psi_H(\mathbf{x}_2, t_2) \psi_H^+(\mathbf{x}_3, t_3) \psi_H^+(\mathbf{x}_4, t_4) | \Psi_0 \rangle \quad (7.70)$$

descrive l'evoluzione dello stato al quale nei tempi t_3 e t_4 sono state aggiunte due particelle.

2. $t_1, t_2 < t_3, t_4$ che implica

$$(-i)^2 G(\mathbf{x}_1, t_1, \mathbf{x}_2, t_2, \mathbf{x}_3, t_3, \mathbf{x}_4, t_4) \equiv \langle \Psi_0 | \psi_H^+(\mathbf{x}_3, t_3) \psi_H^+(\mathbf{x}_4, t_4) \psi_H(\mathbf{x}_1, t_1) \psi_H(\mathbf{x}_2, t_2) | \Psi_0 \rangle \quad (7.71)$$

descrive l'evoluzione dello stato al quale nei tempi t_1 e t_2 sono stati creati due buchi.

3. $t_1, t_3 > t_2, t_4$ che implica

$$(-i)^2 G(\mathbf{x}_1, t_1, \mathbf{x}_2, t_2, \mathbf{x}_3, t_3, \mathbf{x}_4, t_4) = -\langle \Psi_0 | \psi_H(\mathbf{x}_1, t_1) \psi_H^+(\mathbf{x}_3, t_3) \psi_H(\mathbf{x}_2, t_2) \psi_H^+(\mathbf{x}_4, t_4) | \Psi_0 \rangle \quad (7.72)$$

e descrive l'evoluzione di una coppia particella-buca.

L'ultimo è il caso che ci interessa maggiormente. Dato che siamo in ambito non relativistico, la creazione, e la distruzione, di una coppia particella-buca è istantanea, quindi

$$t_1 = t_3 = t' \quad \text{e} \quad t_2 = t_4 = t \quad (7.73)$$

Per quest'ultimo caso riscriviamo la funzione di Green in termini di operatori di creazione e distruzione

$$\begin{aligned} G(\mathbf{x}_1, t, \mathbf{x}_2, t', \mathbf{x}_3, t, \mathbf{x}_4, t') &= \\ & \sum_{\nu_1 \nu_2 \nu_3 \nu_4} \phi_{\nu_1}(\mathbf{x}_1) \phi_{\nu_3}^*(\mathbf{x}_3) \phi_{\nu_2}(\mathbf{x}_2) \phi_{\nu_4}^*(\mathbf{x}_4) \langle \Psi_0 | T[a_{\nu_1}(t') a_{\nu_3}^+(t') a_{\nu_2}(t) a_{\nu_4}^+(t)] | \Psi_0 \rangle \\ &= \sum_{\nu_1 \nu_2 \nu_3 \nu_4} \phi_{\nu_1}(\mathbf{x}_1) \phi_{\nu_2}(\mathbf{x}_2) \phi_{\nu_3}^*(\mathbf{x}_3) \phi_{\nu_4}^*(\mathbf{x}_4) G(\nu_1, t', \nu_2, t, \nu_3, t', \nu_4, t) \end{aligned} \quad (7.74)$$

Nell'espressione precedente gli operatori di creazione sono espressi in rappresentazione di Heisenberg.

Definiamo la parte ritardata, R della funzione di Green considerando il caso $t' > t$

$$\begin{aligned} G^R(\nu_1, t', \nu_2, t, \nu_3, t', \nu_4, t) &= \langle \Psi_0 | a_{\nu_1}(t') a_{\nu_3}^+(t') a_{\nu_2}(t) a_{\nu_4}^+(t) | \Psi_0 \rangle \\ &= \langle \Psi_0 | e^{iHt'} a_{\nu_1} e^{-iHt'} e^{iHt'} a_{\nu_3}^+ e^{-iHt'} e^{iHt} a_{\nu_2} e^{-iHt} e^{iHt} a_{\nu_4}^+ e^{-iHt} | \Psi_0 \rangle \\ &= \langle \Psi_0 | a_{\nu_1} a_{\nu_3}^+ e^{-i(H-E_0)(t'-t)} a_{\nu_2} a_{\nu_4}^+ | \Psi_0 \rangle \end{aligned} \quad (7.75)$$

dove ho usato $H|\Psi_0\rangle = E_0|\Psi_0\rangle$. In maniera analoga, definiamo la funzione di Green avanzata, G^A , per il caso $t' < t$, come

$$G^A(\nu_1, t', \nu_2, t, \nu_3, t', \nu_4, t) = \langle \Psi_0 | a_{\nu_2} a_{\nu_4}^+ e^{+i(H-E_0)(t'-t)} a_{\nu_1} a_{\nu_3}^+ | \Psi_0 \rangle \quad (7.76)$$

quindi si ha

$$G(\nu_1, \nu_2, \nu_3, \nu_4, \tau) = \begin{cases} G^A(\nu_1, t', \nu_2, t, \nu_3, t', \nu_4, t) & \text{per } \tau = t' - t < 0 \\ G^R(\nu_1, t', \nu_2, t, \nu_3, t', \nu_4, t) & \text{per } \tau = t' - t > 0 \end{cases} \quad (7.77)$$

7.2.1 Rappresentazione di Lehmann

Definiamo la funzione di Green a due corpi dipendente dall'energia.

$$G(\nu_1, \nu_2, \nu_3, \nu_4, E) = \int_{-\infty}^{\infty} d\tau G(\nu_1, \nu_2, \nu_3, \nu_4, \tau) e^{iE\tau} \quad (7.78)$$

Consideriamo la parte ritardata

$$G^R(\nu_1, \nu_2, \nu_3, \nu_4, E) = \langle \Psi_0 | a_{\nu_1} a_{\nu_3}^+ \int_0^{\infty} d\tau e^{-i(H-E_0-E)\tau} a_{\nu_2} a_{\nu_4}^+ | \Psi_0 \rangle \quad (7.79)$$

Possiamo scrivere il valore dell'integrale sul tempo come

$$\lim_{\eta \rightarrow 0} \int_0^{\infty} d\tau e^{i(-H+E_0+E+i\eta)\tau} = \lim_{\eta \rightarrow 0} \frac{e^{i(E-H+E_0)\tau} e^{-\eta\tau}}{i(E-H+E_0+i\eta)} \Big|_0^{\infty} = \lim_{\eta \rightarrow 0} \frac{i}{E-H+E_0+i\eta} \quad (7.80)$$

quindi

$$G^R(\nu_1, \nu_2, \nu_3, \nu_4, E) = \langle \Psi_0 | a_{\nu_1} a_{\nu_3}^+ \frac{i}{E-H+E_0+i\eta} a_{\nu_2} a_{\nu_4}^+ | \Psi_0 \rangle \quad (7.81)$$

Con un calcolo analogo otteniamo per la parte avanzata

$$G^A(\nu_1, \nu_2, \nu_3, \nu_4, E) = \langle \Psi_0 | a_{\nu_2} a_{\nu_4}^+ \int_{-\infty}^0 d\tau e^{i(H-E_0+E)\tau} a_{\nu_1} a_{\nu_3}^+ | \Psi_0 \rangle \quad (7.82)$$

$$\lim_{\eta \rightarrow 0} \int_{-\infty}^0 d\tau e^{i(H-E_0+E-i\eta)\tau} = \lim_{\eta \rightarrow 0} \frac{e^{i(E+H-E_0)\tau} e^{\eta\tau}}{i(E+H-E_0-i\eta)} \Big|_{-\infty}^0 = \lim_{\eta \rightarrow 0} \frac{-i}{E+H-E_0-i\eta} \quad (7.83)$$

$$G^A(\nu_1, \nu_2, \nu_3, \nu_4, E) = (-1) \langle \Psi_0 | a_{\nu_2} a_{\nu_4}^+ \frac{i}{E+H-E_0-i\eta} a_{\nu_1} a_{\nu_3}^+ | \Psi_0 \rangle \quad (7.84)$$

quindi

$$\begin{aligned} -iG(\nu_1, \nu_2, \nu_3, \nu_4, E) &= -i(G^R + G^A) = \langle \Psi_0 | a_{\nu_1} a_{\nu_3}^+ \frac{1}{E-H+E_0+i\eta} a_{\nu_2} a_{\nu_4}^+ | \Psi_0 \rangle \\ &\quad - \langle \Psi_0 | a_{\nu_2} a_{\nu_4}^+ \frac{1}{E+H-E_0-i\eta} a_{\nu_1} a_{\nu_3}^+ | \Psi_0 \rangle \end{aligned} \quad (7.85)$$

Inserendo la completezza delle autofunzioni di H $\sum_n |\Psi_n\rangle \langle \Psi_n| = 1$ e considerando $H|\Psi_n\rangle = E_n|\Psi_n\rangle$ otteniamo l'espressione

$$-iG(\nu_1, \nu_2, \nu_3, \nu_4, E) = \sum_n \left[\frac{\langle \Psi_0 | a_{\nu_1} a_{\nu_3}^+ | \Psi_n \rangle \langle \Psi_n | a_{\nu_2} a_{\nu_4}^+ | \Psi_0 \rangle}{E - (E_n - E_0) + i\eta} - \frac{\langle \Psi_0 | a_{\nu_2} a_{\nu_4}^+ | \Psi_n \rangle \langle \Psi_n | a_{\nu_1} a_{\nu_3}^+ | \Psi_0 \rangle}{E + (E_n - E_0) - i\eta} \right] \quad (7.86)$$

In questa espressione gli stati $|\Psi_n\rangle$ hanno lo stesso numero di particelle dello stato fondamentale. I poli di questa espressione $E = E_n - E_0$ rappresentano le energie di eccitazione del sistema di N particelle.

7.3 Risposta lineare

Consideriamo che il sistema di molte particelle sia soggetto ad una perturbazione esterna. Scriviamo l'hamiltoniana totale descrivente il sistema perturbato come somma dell'hamiltoniana H che descrive il sistema senza perturbazione, ed indichiamo con $|\Psi\rangle$ i suoi autostati, e il termine perturbativo $H^{\text{ext}}(t)$

$$H^{\text{tot}} = H + H^{\text{ext}}(t) \quad (7.87)$$

dove abbiamo

$$H^{\text{ext}}(t) = BF(t) \quad (7.88)$$

con $F(t) = 0$ per $t < t_0 = 0$. Questo significa che la perturbazione viene accesa dopo un tempo stabilito, che definiamo il tempo zero. Supponiamo che una volta accesa la perturbazione, quindi per $t > 0$, i tempi di reazione del sistema siano molto più rapidi dell'accendersi e spegnersi della perturbazione. Quindi, per tempi in cui l'interazione è completamente accesa, l'hamiltoniana è $H^{\text{tot}} = H + B$. In questo caso possiamo trattare B come il termine perturbativo dell'hamiltoniana totale indipendente dal tempo. Per questo motivo possiamo considerare la rappresentazione di interazione, la cui equazione del moto, per gli stati, è data da:

$$i \frac{\partial}{\partial t} |\Psi_I(t)\rangle = B_I(t) |\Psi_I(t)\rangle \quad (7.89)$$

dove

$$B_I(t) = e^{iHt} B e^{-iHt} \quad \text{e} \quad |\Psi_I(t)\rangle = e^{iHt} |\Psi(t)\rangle \quad (7.90)$$

dove utilizzo la convenzione che stati e operatori senza pedice sono in rappresentazione di Schrödinger. Integro l'equazione (7.89)

$$\begin{aligned} i \int_{-\infty}^t dt' \frac{\partial}{\partial t'} |\Psi_I(t')\rangle &= \int_{-\infty}^t dt' B_I(t') |\Psi_I(t')\rangle \\ i [|\Psi_I(t)\rangle - |\Psi_I(-\infty)\rangle] &= \int_{-\infty}^t dt' B_I(t') |\Psi_I(t')\rangle \\ |\Psi_I(t)\rangle &= |\Psi_I(-\infty)\rangle - i \int_{-\infty}^t dt' B_I(t') |\Psi_I(t')\rangle \end{aligned} \quad (7.91)$$

Dato che la perturbazione è spenta per $t = -\infty$ abbiamo $|\Psi_I(-\infty)\rangle = |\Psi_0\rangle$. Possiamo esprimere l'equazione precedente in termini perturbativi iterando la presenza di $|\Psi_I(-\infty)\rangle$

$$|\Psi_I(t)\rangle = |\Psi_0\rangle - i \int_{-\infty}^t dt' B_I(t') |\Psi_0\rangle + \dots \quad (7.92)$$

Supponiamo che il sistema risponda con l'operatore D alla perturbazione. Il valore di aspettazione di questo operatore è dato da

$$\begin{aligned} &\langle \Psi_I(t) | D_I(t) | \Psi_I(t) \rangle \\ &= \left\{ \langle \Psi_0 | + i \int_{-\infty}^t dt' B_I(t') \langle \Psi_0 | + \dots \right\} D_I(t) \left\{ |\Psi_0\rangle - i \int_{-\infty}^t dt' B_I(t') |\Psi_0\rangle + \dots \right\} \\ &= \langle \Psi_0 | D_I(t) | \Psi_0 \rangle + i \int_{-\infty}^t dt' \langle \Psi_0 | [B_I(t'), D_I(t)] | \Psi_0 \rangle + \dots \end{aligned} \quad (7.93)$$

Definisco la funzione risposta come

$$R(t' - t) = \begin{cases} 0 & \text{per } t' < t \\ i \langle \Psi_0 | [B_I(t'), D_I(t)] | \Psi_0 \rangle & \text{per } t' > t \end{cases} \quad (7.94)$$

questa definizione implica la causalità. Il sistema non può rispondere prima che la perturbazione sia stata accesa.

Esplicitando la dipendenza temporale di $B_I(t')$ e $D_I(t)$,

$$B_I(t') = e^{iHt'} B e^{-iHt'} \quad ; \quad D_I(t) = e^{iHt} D e^{-iHt} \quad (7.95)$$

possiamo esprimere la risposta come

$$R(t' - t) = i \langle \Psi_0 | B e^{i(H-E_0)(t-t')} D | \Psi_0 \rangle - i \langle \Psi_0 | D e^{-i(H-E_0)(t-t')} B | \Psi_0 \rangle \quad (7.96)$$

e, dato che dipende solo dalla differenza dei tempi $\tau = t' - t$, usando la definizione di trasformata di Fourier, otteniamo

$$\begin{aligned} R(E) &= \int_{-\infty}^{\infty} d\tau R(\tau) e^{iE\tau} \\ &= i \langle \Psi_0 | B \int_{-\infty}^{\infty} d\tau e^{i(H-E_0+E)\tau} D | \Psi_0 \rangle - i \langle \Psi_0 | D \int_{-\infty}^{\infty} d\tau e^{-i(H-E_0-E)\tau} B | \Psi_0 \rangle \\ &= - \langle \Psi_0 | B (H - E_0 + E + i\eta)^{-1} D | \Psi_0 \rangle - \langle \Psi_0 | D (H - E_0 - E - i\eta)^{-1} B | \Psi_0 \rangle \end{aligned} \quad (7.97)$$

Inserisco la completezza $\sum_n |\Psi_n\rangle \langle \Psi_n| = 1$

$$R(E) = \sum_n \left[\frac{\langle \Psi_0 | D | \Psi_n \rangle \langle \Psi_n | B | \Psi_0 \rangle}{E - (E_n - E_0) + i\eta} - \frac{\langle \Psi_0 | B | \Psi_n \rangle \langle \Psi_n | D | \Psi_0 \rangle}{E + (E_n - E_0) + i\eta} \right] \quad (7.98)$$

I poli di $R(E)$ corrispondono alle energie di eccitazione del sistema. Per ogni polo positivo c'è un polo negativo, uguale a quello positivo in valore assoluto.

Consideriamo l'espressione di Dirac

$$\frac{1}{x' - x \pm i\eta} = P \frac{1}{x' - x} \mp i\pi \delta(x - x') \quad (7.99)$$

dove P indica la parte principale, quindi

$$\delta(x - x') = -\frac{1}{\pi} \Im \left(\frac{1}{x' - x \pm i\eta} \right) \quad (7.100)$$

con \Im parte immaginaria. Supponiamo che $D = B$, come in realtà avviene normalmente, e consideriamo solo le energie positive. La probabilità di transizione è data da

$$S(E) = -\frac{1}{\pi} \Im(R(E)) = \sum_n |\langle \Psi_0 | B | \Psi_n \rangle|^2 \delta(E - (E_n - E_0)) \quad (7.101)$$

Ipotizzando che B sia un operatore ad un corpo

$$B = \sum_{\nu_1 \nu_2} B_{\nu_1 \nu_2} a_{\nu_1} a_{\nu_2}^+ \quad \text{e} \quad B_{\nu_1 \nu_2} = \int d^3r \phi_{\nu_1}^*(\mathbf{r}) B(\mathbf{r}) \phi_{\nu_2}(\mathbf{r}) \quad (7.102)$$

otteniamo

$$\begin{aligned} R(E) &= \sum_{\nu_1 \nu_2} \sum_{\nu_3 \nu_4} \sum_n \left[B_{\nu_1 \nu_2} B_{\nu_3 \nu_4}^* \frac{\langle \Psi_0 | a_{\nu_1} a_{\nu_2}^+ | \Psi_n \rangle \langle \Psi_n | a_{\nu_3} a_{\nu_4}^+ | \Psi_0 \rangle}{E - (E_n - E_0) + i\eta} \right. \\ &\quad \left. - B_{\nu_3 \nu_4} B_{\nu_1 \nu_2}^* \frac{\langle \Psi_0 | a_{\nu_3} a_{\nu_4}^+ | \Psi_n \rangle \langle \Psi_n | a_{\nu_1} a_{\nu_2}^+ | \Psi_0 \rangle}{E + (E_n - E_0) + i\eta} \right] \end{aligned} \quad (7.103)$$

Poiché B è hermitiano, $B_{\nu_1\nu_2} = B_{\nu_2\nu_1}^*$ e gli indici ν sono muti, possiamo scrivere

$$\begin{aligned}
R(E) &= \sum_{\nu_1\nu_2} \sum_{\nu_3\nu_4} B_{\nu_1\nu_2} B_{\nu_3\nu_4}^* \\
&\sum_n \left[\frac{\langle \Psi_0 | a_{\nu_1} a_{\nu_2}^+ | \Psi_n \rangle \langle \Psi_n | a_{\nu_3} a_{\nu_4}^+ | \Psi_0 \rangle}{E - (E_n - E_0) + i\eta} - \frac{\langle \Psi_0 | a_{\nu_3} a_{\nu_4}^+ | \Psi_n \rangle \langle \Psi_n | a_{\nu_1} a_{\nu_2}^+ | \Psi_0 \rangle}{E + (E_n - E_0) + i\eta} \right] \\
&= \sum_{\nu_1\nu_2} \sum_{\nu_3\nu_4} B_{\nu_1\nu_2} B_{\nu_3\nu_4}^* (-i)G(\nu_1, \nu_3, \nu_2, \nu_4, E)
\end{aligned} \tag{7.104}$$

dove, nell'ultimo passaggio, è stata considerata l'espressione (7.86) della funzione di Green a due corpi in rappresentazione di Lehmann. La probabilità di transizione è data da

$$S(E) = -\frac{1}{\pi} \Im(R(E)) = \sum_{\nu_1\nu_2} \sum_{\nu_3\nu_4} B_{\nu_1\nu_2} B_{\nu_3\nu_4}^* \frac{\Im}{\pi} (iG(\nu_1, \nu_3, \nu_2, \nu_4, E)) \tag{7.105}$$

7.4 Equazioni del moto

In questo paragrafo otterrò delle equazioni che descrivono l'evoluzione temporale delle funzioni di Green. Consideriamo l'hamiltoniana totale come somma di un termine ad un corpo H_0 ed uno a due corpi H_1 .

$$\begin{aligned}
H &= H_0 + H_1 = \int d^3x \psi^+(\mathbf{x}) h(\mathbf{x}) \psi(\mathbf{x}) \\
&+ \frac{1}{2} \int d^3x d^3y \psi^+(\mathbf{x}) \psi^+(\mathbf{y}) V(\mathbf{x}, \mathbf{y}) \psi(\mathbf{y}) \psi(\mathbf{x})
\end{aligned} \tag{7.106}$$

dove $h(\mathbf{x})$ in aggiunta al termine di energia cinetica può contenere anche un termine di potenziale medio, ad un corpo. Utilizzando le tecniche adottate per ottenere le equazioni (7.19) e (7.22), ottengo

$$[\psi(\mathbf{r}), H_0] = h(\mathbf{r})\psi(\mathbf{r}) \tag{7.107}$$

$$[\psi(\mathbf{r}), H_1] = \int d^3x \psi^+(\mathbf{x}) V(\mathbf{r}, \mathbf{x}) \psi(\mathbf{x}) \psi(\mathbf{r}) \tag{7.108}$$

$$[\psi^+(\mathbf{r}), H_0] = -\psi^+(\mathbf{r})h(\mathbf{r}) \tag{7.109}$$

$$[\psi^+(\mathbf{r}), H_1] = -\int d^3x \psi^+(\mathbf{r}) \psi^+(\mathbf{x}) V(\mathbf{r}, \mathbf{x}) \psi(\mathbf{x}) \tag{7.110}$$

Consideriamo le equazioni del moto in rappresentazione di Heisenberg

$$i \frac{\partial}{\partial t} \psi = [\psi, H] \tag{7.111}$$

Dalla definizione di funzione di Green ad un corpo otteniamo

$$\begin{aligned}
i \frac{\partial}{\partial t} G(\mathbf{x}, t, \mathbf{x}', t') &= \langle \Psi_0 | \psi_{\text{H}}(\mathbf{x}, t) \psi_{\text{H}}^+(\mathbf{x}', t') | \Psi_0 \rangle \frac{\partial \theta(t - t')}{\partial t} \\
&- \langle \Psi_0 | \psi_{\text{H}}^+(\mathbf{x}', t') \psi_{\text{H}}(\mathbf{x}, t) | \Psi_0 \rangle \frac{\partial \theta(t' - t)}{\partial t} \\
&+ \langle \Psi_0 | \frac{\partial \psi_{\text{H}}(\mathbf{x}, t)}{\partial t} \psi_{\text{H}}^+(\mathbf{x}', t') | \Psi_0 \rangle \theta(t - t') \\
&- \langle \Psi_0 | \psi_{\text{H}}^+(\mathbf{x}', t') \frac{\partial \psi_{\text{H}}(\mathbf{x}, t)}{\partial t} | \Psi_0 \rangle \theta(t' - t)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= \langle \Psi_0 | \psi_H(\mathbf{x}, t) \psi_H^+(\mathbf{x}', t') | \Psi_0 \rangle \delta(t - t') \\
&- \langle \Psi_0 | \psi_H^+(\mathbf{x}', t') \psi_H(\mathbf{x}, t) | \Psi_0 \rangle (-\delta(t - t')) \\
&+ (-i) \langle \Psi_0 | [\psi_H(\mathbf{x}, t), H] \psi_H^+(\mathbf{x}', t') | \Psi_0 \rangle \theta(t - t') \\
&- (-i) \langle \Psi_0 | \psi_H^+(\mathbf{x}', t') [\psi_H(\mathbf{x}, t), H] | \Psi_0 \rangle \theta(t' - t)
\end{aligned}$$

Dai primi due termini si ottiene un anticommutatore tra ψ e ψ^+ . Considerando le equazioni dei commutatori tra hamiltoniana e operatori di campo scritte in precedenza otteniamo

$$\begin{aligned}
i \frac{\partial}{\partial t} G(\mathbf{x}, t, \mathbf{x}', t') &= \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \delta(t - t') + h(\mathbf{x}) \langle \Psi_0 | T [\psi_H(\mathbf{x}, t) \psi_H^+(\mathbf{x}', t')] | \Psi_0 \rangle (-i) \\
&+ \langle \Psi_0 | T [[\psi_H(\mathbf{x}, t), H_1] \psi_H^+(\mathbf{x}', t')] | \Psi_0 \rangle (-i)
\end{aligned} \tag{7.112}$$

dove ho indicato con T l'operatore di ordinamento temporale. Il fattore del secondo termine è la definizione di funzione di Green ad un corpo, quindi

$$\left[i \frac{\partial}{\partial t} - h(\mathbf{x}) \right] G(\mathbf{x}, t, \mathbf{x}', t') = \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \delta(t - t') - i \langle \Psi_0 | T [[\psi_H(\mathbf{x}, t), H_1] \psi_H^+(\mathbf{x}', t')] | \Psi_0 \rangle \tag{7.113}$$

Per la (7.108) l'ultimo termine può essere scritto come

$$\begin{aligned}
&\langle \Psi_0 | T \left[\int d^3 y \psi_H^+(\mathbf{y}, t) V(\mathbf{x}, \mathbf{y}) \psi_H(\mathbf{y}, t) \psi_H(\mathbf{x}, t) \psi_H^+(\mathbf{x}', t') \right] | \Psi_0 \rangle \\
&= \int d^3 y V(\mathbf{x}, \mathbf{y}) \langle \Psi_0 | T [\psi_H(\mathbf{y}, t) \psi_H(\mathbf{x}, t) \psi_H^+(\mathbf{y}, t) \psi_H^+(\mathbf{x}', t')] | \Psi_0 \rangle \\
&= \int d^3 y V(\mathbf{x}, \mathbf{y}) (i)^2 G(\mathbf{y}, t, \mathbf{x}, t, \mathbf{y}, t, \mathbf{x}', t')
\end{aligned} \tag{7.114}$$

dove ho sostituito la definizione di funzione di Green a due corpi. L'ambiguità del tempo da associare a \mathbf{y} e \mathbf{x} è chiarita considerando che i tre operatori di campo, che dipendono da queste variabili, provengono da un solo blocco definito al tempo t .

L'equazione del moto può essere riscritta come

$$\left[i \frac{\partial}{\partial t} - h(\mathbf{x}) \right] G(\mathbf{x}, t, \mathbf{x}', t') = \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \delta(t - t') + i \int d^3 y V(\mathbf{x}, \mathbf{y}) G(\mathbf{y}, t, \mathbf{x}, t, \mathbf{y}, t, \mathbf{x}', t') \tag{7.115}$$

Per un sistema imperturbato, $V(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = 0$ abbiamo

$$\left[i \frac{\partial}{\partial t} - h(\mathbf{x}) \right] G^0(\mathbf{x}, t, \mathbf{x}', t') = \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \delta(t - t') \tag{7.116}$$

che permette di ottenere una espressione integrale dell'equazione del moto

$$G(\mathbf{x}, t, \mathbf{x}', t') = G^0(\mathbf{x}, t, \mathbf{x}', t') + i \int d^3 y d^3 z G^0(\mathbf{x}, t, \mathbf{y}, t) V(\mathbf{y}, \mathbf{z}) G(\mathbf{z}, t, \mathbf{y}, t, \mathbf{z}, t, \mathbf{x}', t') \tag{7.117}$$

L'equazione del moto, in forma differenziale (7.115) oppure integrale (7.117), per la funzione di Green ad un corpo contiene la funzione di Green a due corpi per il sistema interagente.

In generale possiamo definire una funzione di Green a n corpi

$$\begin{aligned}
&(i)^n G_n(\mathbf{x}_1, t_1, \dots, \mathbf{x}_n, t_n; \mathbf{x}'_1, t'_1, \dots, \mathbf{x}'_n, t'_n) \\
&\equiv \frac{\langle \Psi_0 | T [\psi_H(\mathbf{x}_1, t_1) \dots \psi_H(\mathbf{x}_n, t_n) \psi_H^+(\mathbf{x}'_1, t'_1) \dots \psi_H^+(\mathbf{x}'_n, t'_n)] | \Psi_0 \rangle}{\langle \Psi_0 | \Psi_0 \rangle}
\end{aligned} \tag{7.118}$$

L'equazione del moto per una funzione di Green a n corpi richiede l'informazione sulla funzione di Green a $n + 1$ corpi.

$$\begin{aligned}
& \left[i \frac{\partial}{\partial t_1} - h(\mathbf{x}_1) \right] G_n(\mathbf{x}_1, t_1, \dots, \mathbf{x}_n, t_n; \mathbf{x}'_1, t'_1, \dots, \mathbf{x}'_n, t'_n) \\
&= \sum_{i=1}^n \delta(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_i) \delta(t_1 - t_i) (-1)^{n-i} G_{n-1}(\mathbf{x}_1, t_1, \dots, \mathbf{x}_{n-1}, t_{n-1}; \mathbf{x}'_1, t'_1, \dots, \mathbf{x}'_{n-1}, t'_{n-1}) \\
&+ i \int d^3y V(\mathbf{x}, \mathbf{y}) G_{n+1}(\mathbf{x}_1, t_1, \dots, \mathbf{x}_{n+1}, t_{n+1}; \mathbf{x}'_1, t'_1, \dots, \mathbf{x}'_{n+1}, t'_{n+1}) \tag{7.119}
\end{aligned}$$

In questo modo, si ha un sistema di equazioni accoppiate con funzioni di Green legate a diversi numeri di particelle. Il problema non è pragmaticamente risolvibile, è sempre necessario avere l'informazione su una funzione di Green contenente un numero di particelle superiore a quella cercata. In ogni caso, il problema è formulato in una serie di equazioni che diventano gerarchicamente più complicate. Se fosse possibile rompere la gerarchia facendo un'ipotesi sull'espressione della funzione di Green a n particelle, in linea di principio sarebbe possibile calcolare poi le funzioni di Green di rango inferiore. Dal punto di vista pragmatico si tratta comunque di una procedura molto complicata. Normalmente si preferisce utilizzare una procedura perturbativa, come quella che verrà descritta nel Capitolo 8.

Capitolo 8

Descrizione perturbativa della funzione di Green

La teoria perturbativa sviluppata nel Cap. 3 può essere utilizzata per il calcolo della funzione di Green. Considererò la funzione di Green ad un corpo.

Ricordo alcune relazioni presentate nel paragrafo 7.1.4.

$$U(t, 0) = e^{-iH_1 t} ; U(0, t) = e^{iH_1 t} \quad (8.1)$$

$$\mathcal{O}_H(t) = e^{iH_1 t} \mathcal{O}_I(t) e^{-iH_1 t} = U(0, t) \mathcal{O}_I U(t, 0) \quad (8.2)$$

$$|\Psi_H\rangle = |\Psi_I(0)\rangle = |\Psi_S(0)\rangle = U_\epsilon(0, -\infty) |\Phi_0\rangle = |\Psi_0\rangle \quad (8.3)$$

Usando la tecnica dell'accensione adiabatica dell'interazione, presentata nel paragrafo 3.4, possiamo esprimere il valore di aspettazione di un operatore in rappresentazione di Heisenberg come

$$\begin{aligned} \frac{\langle \Psi_0 | \mathcal{O}_H(t) | \Psi_0 \rangle}{\langle \Psi_0 | \Psi_0 \rangle} &= \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{\langle \Phi_0 | U_\epsilon(+\infty, 0) [U_\epsilon(0, t) \mathcal{O}_I(t) U_\epsilon(t, 0)] U_\epsilon(0, -\infty) | \Phi_0 \rangle}{\langle \Phi_0 | U_\epsilon(+\infty, -\infty) | \Phi_0 \rangle} \\ &= \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{\langle \Phi_0 | U_\epsilon(+\infty, t) \mathcal{O}_I(t) U_\epsilon(t, -\infty) | \Phi_0 \rangle}{\langle \Phi_0 | U_\epsilon(+\infty, -\infty) | \Phi_0 \rangle} \end{aligned}$$

Dato che

$$\begin{aligned} U_\epsilon(+\infty, t) \mathcal{O}_I(t) U_\epsilon(t, -\infty) &= \\ \sum_{n=0}^{\infty} (-i)^n \frac{1}{n!} \int_t^{\infty} dt_1 \cdots \int_t^{\infty} dt_n e^{-\epsilon(|t_1| + \cdots + |t_n|)} T [H_{I,1}(t_1) \cdots H_{I,1}(t_n)] \mathcal{O}_I(t) \\ \sum_{m=0}^{\infty} (-i)^m \frac{1}{m!} \int_{-\infty}^t dt'_1 \cdots \int_{-\infty}^t dt'_m e^{-\epsilon(|t'_1| + \cdots + |t'_m|)} T [H_{I,1}(t'_1) \cdots H_{I,1}(t'_m)] \end{aligned} \quad (8.4)$$

possiamo riscrivere la funzione di Green ad un corpo come

$$iG(x, y) = \sum_{\mu=0}^{\infty} (-i)^\mu \frac{1}{\mu!} \int_{-\infty}^{\infty} dt_1 \cdots \int_{-\infty}^{\infty} dt_\mu \frac{\langle \Phi_0 | T [H_{I,1}(t_1) \cdots H_{I,1}(t_\mu) \psi_I(x) \psi_I^\dagger(y)] | \Phi_0 \rangle}{\langle \Phi_0 | U(+\infty, -\infty) | \Phi_0 \rangle} \quad (8.5)$$

dove sono stati utilizzati i simboli $x \equiv (\mathbf{x}, t_x)$, ed analogamente per y .

Consideriamo un'interazione istantanea

$$\mathcal{V}(x, x') \equiv V(\mathbf{x}, \mathbf{x}') \delta(t - t') \quad (8.6)$$

quindi il termine perturbativo dell'hamiltoniana può essere scritto come

$$H_{I,1}(t, t') = \frac{1}{2} \int d^3x \int d^3x' \psi_1^\dagger(x) \psi_1^\dagger(x') V(\mathbf{x}, \mathbf{x}') \delta(t - t') \psi_1(x') \psi_1(x) \quad (8.7)$$

Il numeratore dell'equazione (8.5) può essere riscritto come

$$\begin{aligned} iG^{\text{num}}(x, y) &= \langle \Phi_0 | T [\psi_1(x) \psi_1^\dagger(y)] | \Phi_0 \rangle \\ &+ (-i) \int_{-\infty}^{\infty} dt_1 \langle \Phi_0 | T [H_{I,1}(t_1) \psi_1(x) \psi_1^\dagger(y)] | \Phi_0 \rangle + \dots \\ &= iG^0(x, y) + (-i) \int_{-\infty}^{\infty} dt_1 \langle \Phi_0 | T \left[\frac{1}{2} \int d^3x_1 \int d^3x'_1 \psi_1^\dagger(x_1) \psi_1^\dagger(x'_1) \right. \\ &\quad \left. V(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}'_1) \delta(t_1 - t'_1) \psi_1(x'_1) \psi_1(x_1) \psi_1(x) \psi_1^\dagger(y) \right] | \Phi_0 \rangle + \dots \end{aligned} \quad (8.8)$$

La presenza di $\delta(t_1 - t'_1)$ permette di inserire un integrale su t'_1 quindi possiamo scrivere

$$\begin{aligned} iG^{\text{num}}(x, y) &= iG^0(x, y) \\ &+ (-i) \frac{1}{2} \int d^4x_1 \int d^4x'_1 V(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}'_1) \delta(t_1 - t'_1) \\ &\quad \langle \Phi_0 | T [\psi_1^\dagger(x_1) \psi_1^\dagger(x'_1) \psi_1(x'_1) \psi_1(x_1) \psi_1(x) \psi_1^\dagger(y)] | \Phi_0 \rangle + \dots \end{aligned} \quad (8.9)$$

Il calcolo della funzione di Green in teoria perturbativa avviene utilizzando le tecniche presentate nel capitolo 3. Per poter utilizzare il teorema di Wick, è necessario definire la contrazione tra due operatori di campo. Questo è abbastanza immediato perché gli operatori di campo possono essere espressi in termini di operatori di creazione e di distruzione, e abbiamo visto che, per questi ultimi, le proprietà di anticommutazione sono preservate in ogni rappresentazione. Nello specifico della rappresentazione di interazione abbiamo

$$a_{1,k}(t) = a_k e^{-i\omega_k t} ; a_{1,k}^\dagger(t) = a_k^\dagger e^{i\omega_k t} \quad (8.10)$$

Gli operatori di campo sono definiti in termini di operatori di creazione e distruzione come

$$\psi_1^\dagger(x) = \int d^3k \phi_k^*(\mathbf{x}) a_{1,k}^\dagger ; \psi_1(x) = \int d^3k \phi_k(\mathbf{x}) a_{1,k} \quad (8.11)$$

Possiamo scrivere le contrazioni come

$$\begin{aligned} \overline{\psi_1^\dagger(x) \psi_1(y)} &= \int d^3k \int d^3k' \phi_k^*(\mathbf{x}) \phi_{k'}^*(\mathbf{y}) a_{1,k}^\dagger(t_x) a_{1,k'}(t_y) \\ &= \int d^3k \int d^3k' \phi_k^*(\mathbf{x}) e^{-i\omega_k t_x} \phi_{k'}^*(\mathbf{y}) e^{i\omega_{k'} t_y} \overline{a_k^\dagger a_{k'}} \\ &= \int d^3k \int d^3k' \phi_k^*(\mathbf{x}) e^{-i\omega_k t_x} \phi_{k'}^*(\mathbf{y}) e^{i\omega_{k'} t_y} \{T[a_k^\dagger a_{k'}] - N[a_k^\dagger a_{k'}]\} \\ &= T[\psi_1^\dagger(x) \psi_1(y)] - N[\psi_1^\dagger(x) \psi_1(y)] \end{aligned}$$

quindi

$$\begin{aligned} \overline{\psi_1(x) \psi_1^\dagger(y)} &= \langle \Phi_0 | \psi_1(x) \psi_1^\dagger(y) | \Phi_0 \rangle \\ &= \langle \Phi_0 | T[\psi_1(x) \psi_1^\dagger(y)] | \Phi_0 \rangle - \langle \Phi_0 | N[\psi_1(x) \psi_1^\dagger(y)] | \Phi_0 \rangle \\ &= \langle \Phi_0 | T[\psi_1(x) \psi_1^\dagger(y)] | \Phi_0 \rangle = iG^0(x, y) \end{aligned} \quad (8.12)$$

Il calcolo della (8.9) richiede l'uso del teorema di Wick, quindi il calcolo di contrazioni che, come visto sopra, sono espresse in termini di funzione di Green imperturbata. Questo significa che la funzione di Green di un sistema interagente può essere espressa in termini perturbativi in funzione della funzione di Green di un sistema di particelle non interagenti.

8.1 Diagrammi di Goldstone-Feynmann

Considero lo sviluppo perturbativo (8.9) del numeratore della funzione di Green ad un corpo troncato al primo ordine

$$iG^{(1),\text{num}}(x, y) = iG^0(x, y) + (-i)\frac{1}{2} \int d^4x_1 \int d^4x'_1 \mathcal{V}(x_1, x'_1) \langle \Phi_0 | T [\psi_I^+(x_1) \psi_I^+(x'_1) \psi_I(x'_1) \psi_I(x_1) \psi_I(x) \psi_I^+(y)] | \Phi_0 \rangle$$

Applico il teorema di Wick per calcolare l'elemento di matrice

$$\begin{aligned} & \langle \Phi_0 | T [\psi_I^+(x_1) \psi_I^+(x'_1) \psi_I(x'_1) \psi_I(x_1) \psi_I(x) \psi_I^+(y)] | \Phi_0 \rangle \\ &= \langle \Phi_0 | \overbrace{\psi_I^+(x_1) \psi_I^+(x'_1)} \overbrace{\psi_I(x'_1) \psi_I(x_1)} \overbrace{\psi_I(x) \psi_I^+(y)} | \Phi_0 \rangle \\ &+ \langle \Phi_0 | \overbrace{\psi_I^+(x_1) \psi_I^+(x'_1)} \overbrace{\psi_I(x'_1) \psi_I(x_1)} \overbrace{\psi_I(x) \psi_I^+(y)} | \Phi_0 \rangle \\ &+ \langle \Phi_0 | \overbrace{\psi_I^+(x_1) \psi_I^+(x'_1)} \overbrace{\psi_I(x'_1) \psi_I(x_1)} \overbrace{\psi_I(x) \psi_I^+(y)} | \Phi_0 \rangle \\ &+ \langle \Phi_0 | \overbrace{\psi_I^+(x_1) \psi_I^+(x'_1)} \overbrace{\psi_I(x'_1) \psi_I(x_1)} \overbrace{\psi_I(x) \psi_I^+(y)} | \Phi_0 \rangle \\ &+ \langle \Phi_0 | \overbrace{\psi_I^+(x_1) \psi_I^+(x'_1)} \overbrace{\psi_I(x'_1) \psi_I(x_1)} \overbrace{\psi_I(x) \psi_I^+(y)} | \Phi_0 \rangle \\ &+ \langle \Phi_0 | \overbrace{\psi_I^+(x_1) \psi_I^+(x'_1)} \overbrace{\psi_I(x'_1) \psi_I(x_1)} \overbrace{\psi_I(x) \psi_I^+(y)} | \Phi_0 \rangle \end{aligned} \quad (8.13)$$

In termini di funzioni di Green non perturbata

$$\begin{aligned} iG^{(1),\text{num}}(x, y) &= iG^0(x, y) + (-i)\frac{1}{2} \int d^4x_1 \int d^4x'_1 \mathcal{V}(x_1, x'_1) \\ & [iG^0(x, y)][-iG^0(x_1, x_1)][-iG^0(x'_1, x'_1)] \\ & - [iG^0(x, y)][-iG^0(x_1, x'_1)][-iG^0(x'_1, x_1)] \\ & + [-iG^0(x, x_1)][-iG^0(x_1, x'_1)][iG^0(x'_1, y)] \\ & - [-iG^0(x, x_1)][-iG^0(x'_1, x'_1)][iG^0(x_1, y)] \\ & + [-iG^0(x, x'_1)][-iG^0(x'_1, x_1)][iG^0(x_1, y)] \\ & - [-iG^0(x, x'_1)][-iG^0(x_1, x_1)][iG^0(x'_1, y)] \end{aligned} \quad (8.14)$$

Per la descrizione dei termini dello sviluppo perturbativo è comodo utilizzare una rappresentazione grafica. La funzione di Green imperturbata $G^0(x, y)$ è rappresentata da una linea orientata che va da y a x , poichè $t_x > t_y$. L'interazione è rappresentata da una linea tratteggiata. I vari termini dello sviluppo perturbativo (8.14) sono descritti dai diagrammi presentati nella figura 8.1.

I termini A e B della figura 8.1 sono sottounità composte da diagrammi non connessi. Il numeratore della funzione di Green può essere descritto come indica la figura 8.2, ovvero dal prodotto della somma di due diversi tipologie di diagrammi. La prima topologia è composta da tutti i diagrammi connessi che contengono i punti x e y . Questi diagrammi sono rappresentati nella parentesi sinistra della figura. Questi diagrammi sono moltiplicati per quelli della parentesi destra, che sono diagrammi che non contengono i punti x e y .

Questo secondo termine è identico a quello del denominatore perché nel denominatore mancano i termini legati ai punti x e y . Per questo motivo la funzione di Green può essere espressa solo in termini di diagrammi connessi contenenti i punti x e y .

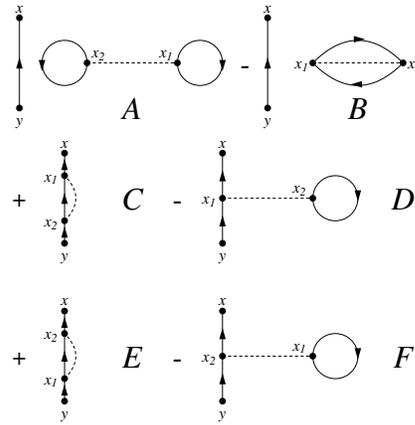


Figura 8.1:

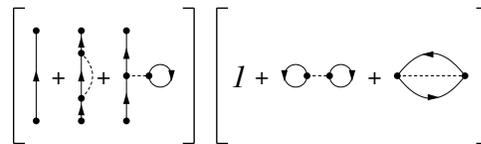


Figura 8.2:

I diagrammi topologicamente uguali, ad esempio C ed E della figura 8.1, così come i diagrammi D e F, danno contributo identico.

La funzione di Green nello spazio delle configurazioni dipende da due coordinate. Per sistemi ad invariata traslazione è utile utilizzare la trasformata di Fourier di questa funzione, definita nello spazio degli impulsi, e dell'energia, perché dipende da una sola variabile, a quattro dimensioni.

$$G(x, y) = \frac{1}{(2\pi)^4} \int d^4 k e^{ik \cdot (x-y)} G(\mathbf{k}, \omega) \tag{8.15}$$

$$G(k) = \int d^4(x-y) e^{-ik \cdot (x-y)} G(\mathbf{k}, \omega) \tag{8.16}$$

dove abbiamo definito $d^4 k \equiv d^3 k d\omega$ e $k \cdot x = \omega t - \mathbf{k} \cdot \mathbf{x}$. Analoga espressione è usata per la G^0 .

Per interazioni istantanee che dipendono solo dalla differenza tra le coordinate delle due particelle interagenti abbiamo

$$\mathcal{V}(x, y) = \frac{1}{(2\pi)^4} \int d^4k e^{-k \cdot (x-y)} \mathcal{V}(k) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int d^3k e^{-\mathbf{k} \cdot (\mathbf{x}-\mathbf{y})} \mathcal{V}(\mathbf{k}) \delta(t_x - t_y) \quad (8.17)$$

Inserendo queste definizioni nell'espressione della funzione di Green, è possibile definire la trasformata di Fourier di espressioni che possono essere interpretate come diagrammi di Feynmann. La peculiarità della rappresentazione degli impulsi è che l'impulso deve essere conservato ad ogni vertice.

8.2 Equazione di Dyson e Autoenergia

L'espressione (8.5) indica che la funzione di Green del sistema interagente è composta dalla funzione di Green non interagente più tutti i diagrammi che possono essere inseriti tra i punti x e y . L'espressione matematica di quanto affermato è

$$G(x, y) = G^0(x, y) + \int d^4x_1 \int d^4x'_1 G^0(x, x_1) \tilde{\Sigma}(x_1, x'_1) G^0(x'_1, y) \quad (8.18)$$

espressione che definisce l'autoenergia (*self-energy*) $\tilde{\Sigma}$.

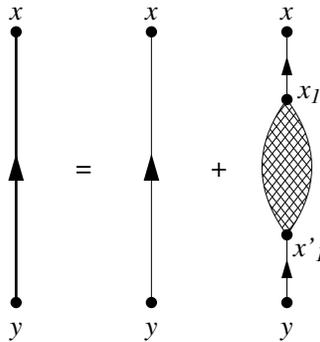


Figura 8.3: Rappresentazione grafica della definizione di autoenergia.

La rappresentazione grafica di questa espressione è data in figura 8.3. La linea orientata più spessa indica la funzione di Green G per il sistema interagente, mentre le linee più sottili indicano la la funzione di Green G^0 per il sistema non interagente. Il blob rappresenta l'autoenergia $\tilde{\Sigma}$.

Dal punto di vista del calcolo della funzione di Green risulta più utile usare l'*autoenergia propria*. Definiamo impropri quei diagrammi che possono essere separati in altri diagrammi tagliando una delle linee che descrivono la G^0 . Nella figura 8.4, dove non sono disegnate le frecce, i diagrammi A e B sono impropri, perché tagliando la linea continua verticale si generano diagrammi separati, mentre i diagrammi C e D della figura sono invece propri, perché non è possibile ottenere diagrammi separati tagliando alcuna linea continua.

Definendo l'autoenergia propria come la somma di tutti i diagrammi propri, possiamo descrivere l'autoenergia impropria come somma infinita di tutte le autoenergie proprie, come indica la figura 8.5, dove il blob con la doppia retinatura indica l'autoenergia impropria, e quelli con la retinatura semplice, l'autoenergia propria. L'espressione matematica di quanto descritto è data dall'equazione

$$\tilde{\Sigma}(x_1, x'_1) = \Sigma(x_1, x'_1) + \int d^4x_2 \int d^4x'_2 \Sigma(x_1, x_2) G^0(x_2, x'_2) \Sigma(x'_2, x'_1)$$

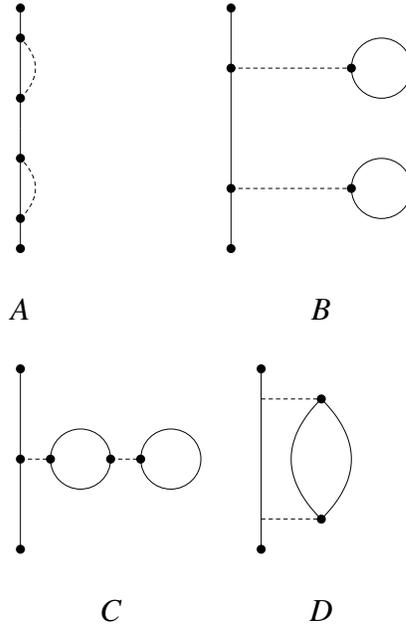


Figura 8.4: Gli inserimenti dei diagrammi A e B sono impropri, mentre C e D sono propri.

$$+ \int d^4 x_2 \int d^4 x'_2 \int d^4 x_3 \int d^4 x'_3 \Sigma(x_1, x_2) G^0(x_2, x'_2) \Sigma(x'_2, x_3) G^0(x_3, x'_3) \Sigma(x'_3, x'_1) + \dots$$

Inserendo questa definizione di autoenergia propria nella (8.18) abbiamo che

$$\begin{aligned} G(x, y) &= G^0(x, y) + \int d^4 x_1 \int d^4 x'_1 G^0(x, x_1) \Sigma(x_1, x'_1) G^0(x'_1, y) \\ &+ \int d^4 x_1 \int d^4 x'_1 \int d^4 x_2 \int d^4 x'_2 G^0(x, x_1) \Sigma(x_1, x'_1) G^0(x'_1, x_2) \Sigma(x_2, x'_2) G^0(x'_2, y) \\ &+ \dots \end{aligned} \quad (8.19)$$

Questa equazione può essere espressa come

$$G(x, y) = G^0(x, y) + \int d^4 x_1 \int d^4 x'_1 G^0(x, x_1) \Sigma(x_1, x'_1) G(x'_1, y) \quad (8.20)$$

Questa espressione è comunemente chiamata **l'equazione di Dyson** e la sua rappresentazione grafica è data in figura 8.6. È da notare che in questa equazione è possibile fare uno sviluppo perturbativo sia della funzione di Green che dell'autoenergia. La situazione è evidente per quanto riguarda lo sviluppo perturbativo di G . Per quanto riguarda Σ , basta considerare il diagramma C della figura 8.4. Per questo diagramma, il primo ordine dello sviluppo contiene un solo loop, ed il diagramma completo è al secondo ordine.

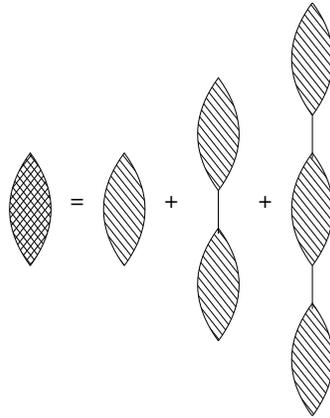


Figura 8.5: L'autoenergia impropria può essere riscritta come somma di termini di autoenergia propria.

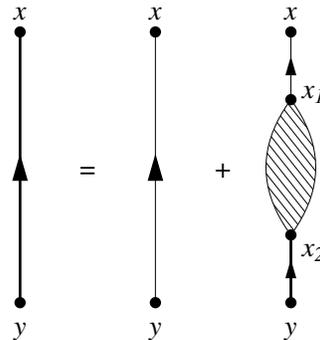


Figura 8.6: Rappresentazione grafica dell'equazione (8.20), di Dyson.

L'equazione di Dyson assume un'espressione più semplice quando è riferita ad un sistema infinito ed omogeneo. In questo caso, possiamo definire

$$G(x, y) = \frac{1}{(2\pi)^4} \int d^4k e^{-k \cdot (x-y)} G(k) \quad \text{e} \quad \Sigma(x, y) = \frac{1}{(2\pi)^4} \int d^4k e^{-k \cdot (x-y)} \Sigma(k) \quad (8.21)$$

Inserendo queste espressioni nell'equazione di Dyson (8.20), ed utilizzando la conservazione del quadrimpulso k otteniamo

$$G(x, y) = \frac{1}{(2\pi)^4} \int d^4k e^{-k \cdot (x-y)} [G^0(k) + G^0(k)\Sigma(k)G(k)] \quad (8.22)$$

quindi l'espressione dell'equazione di Dyson nello spazio degli impulsi è

$$G(k) = [G^0(k) + G^0(k)\Sigma(k)G(k)] \quad (8.23)$$

dalla quale

$$G(k) = \frac{G^0(k)}{1 - G^0(k)\Sigma(k)} = \frac{1}{[G^0(k)]^{-1} - \Sigma(k)} \quad (8.24)$$

Poiché

$$G^0(\mathbf{k}, \omega) = \left[\frac{\Theta(k - k_F)}{\omega - \omega_k + i\eta} + \frac{\Theta(k_F - k)}{\omega - \omega_k - i\eta} \right] \quad (8.25)$$

si ha

$$[G^0(k)]^{-1} = \omega - \omega_k \quad (8.26)$$

quindi

$$G(k) = \frac{1}{\omega - \omega_k - \Sigma(k)} \quad (8.27)$$

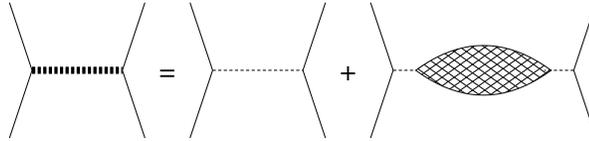


Figura 8.7:

In analogia a quanto fatto per ottenere l'equazione di Dyson, possiamo trattare l'interazione. La figura 8.7 indica come sia possibile considerare l'interazione tra due generiche linee di particella, o buca, definendo il polarizzatore $\tilde{\Pi}$

$$\mathcal{V}(x, y) = \mathcal{V}_0(x, y) + \int d^4x_1 \int d^4x'_1 \mathcal{V}_0(x, x_1) \tilde{\Pi}(x_1, x'_1) \mathcal{V}_0(x'_1, y) \quad (8.28)$$

L'equazione precedente indica che l'interazione tra due particelle che si trovano nel mezzo è composta dall'interazione *nuda* \mathcal{V}_0 , ovvero l'interazione delle due particelle nel vuoto, più tutti i termini dovuti alla polarizzazione del mezzo, che noi descriviamo in termini di eccitazioni virtuali particella-buca. Il polarizzatore improprio $\tilde{\Pi}$ rappresenta tutte queste eccitazioni.

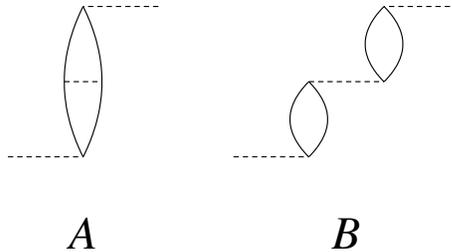


Figura 8.8:

Nella figura 8.8 sono rappresentati due dei possibili diagrammi inseriti nel polarizzatore improprio $\tilde{\Pi}$. Il diagramma A è appartenente alla categoria dei diagrammi definiti come propri perchè non possono essere

separati tagliando alcuna linea di interazione. Il diagramma B ha tre linee di interazione ma tagliando la seconda, può essere separato in due diagrammi propri, per questo motivo appartiene ai diagrammi impropri.

In analogia a quanto abbiamo fatto per l'autoenergia, possiamo descrivere l'interazione in termini di diagrammi propri, definendo il polarizzatore proprio $\tilde{\Pi}$ come contenente solamente diagrammi propri

$$\begin{aligned}\tilde{\Pi}(x_1, x'_1) &= \Pi(x_1, x'_1) + \int d^4x_2 \int d^4x'_2 \Pi(x_1, x_2) \mathcal{V}_0(x_2, x'_2) \Pi(x'_2, x'_1) \\ &+ \int d^4x_2 \int d^4x'_2 \int d^4x_3 \int d^4x'_3 \Pi(x_1, x_2) \mathcal{V}_0(x_2, x'_2) \Pi(x'_2, x_3) \mathcal{V}_0(x_3, x'_3) \Pi(x'_3, x'_1) + \dots \\ &= \Pi(x_1, x'_1) + \int d^4x_2 \int d^4x'_2 \Pi(x_1, x_2) \mathcal{V}_0(x_2, x'_2) \tilde{\Pi}(x'_2, x'_1)\end{aligned}\quad (8.29)$$

Quindi

$$\begin{aligned}\mathcal{V}(x, y) &= \mathcal{V}_0(x, y) + \int d^4x_1 \int d^4x'_1 \mathcal{V}_0(x, x_1) \Pi(x_1, x'_1) \mathcal{V}_0(x'_1, y) \\ &+ \int d^4x_1 \int d^4x'_1 \int d^4x_2 \int d^4x'_2 \mathcal{V}_0(x, x_1) \Pi(x_1, x_2) \mathcal{V}_0(x_2, x'_2) \Pi(x'_2, x'_1) \mathcal{V}_0(x'_1, y) + \dots \\ &= \mathcal{V}_0(x, y) + \int d^4x_1 \int d^4x'_1 \mathcal{V}_0(x, x_1) \Pi(x_1, x'_1) \mathcal{V}(x'_1, y)\end{aligned}\quad (8.30)$$

che è l'analogo dell'equazione di Dyson per l'interazione.

Anche in questo caso, per un sistema ad invarianza traslazionale, quindi infinito ed omogeneo, possiamo definire le trasformate di Fourier e otteniamo

$$\mathcal{V}(k) = \mathcal{V}_0(k) + \mathcal{V}_0(k) \tilde{\Pi}(k) \mathcal{V}_0(k) \quad (8.31)$$

$$\mathcal{V}(k) = \mathcal{V}_0(k) + \mathcal{V}_0(k) \Pi(k) \mathcal{V}(k) \quad (8.32)$$

dalla quale si ottiene

$$\mathcal{V}(k) = \frac{\mathcal{V}_0(k)}{1 - \mathcal{V}_0(k) \Pi(k)} \equiv \frac{\mathcal{V}_0(k)}{\mathcal{K}(k)} \quad (8.33)$$

dove l'ultima equazione definisce \mathcal{K} la funzione dielettrica che modifica l'interazione nuda \mathcal{V}_0 per la presenza del mezzo.

8.3 Hartree - Fock

Un primo approccio alla soluzione dell'equazione di Dyson (8.20) è quello di considerare al posto dell'autoenergia completa gli inserimenti con una sola linea di interazione. Diagrammaticamente questa approssimazione è descritta nella figura 8.9. Normalmente viene considerata un'approssimazione più raffinata, consistente nell'inserire tutte le possibili iterazioni di autoenergia nelle funzioni di Green dei due termini di interazione della figura 8.9. Il risultato di questo inserimento di un numero infinito di autoenergie è presentato nella figura 8.11.

Consideriamo l'equazione di Dyson (8.20)

$$G(x, y) = G^0(x, y) + \int d^4x_1 \int d^4x'_1 G^0(x, x_1) \Sigma(x_1, x'_1) G(x'_1, y)$$

Nell'approssimazione presentata dalla figura 8.9 si ha che l'autoenergia può essere espressa come

$$\Sigma^{(I)}(x_1, x'_1) = -i \left[\delta(x_1 - x'_1) \int d^4x_2 \mathcal{V}(x_1, x_2) G^0(x_2, x_2) - \mathcal{V}(x_1, x'_1) G^0(x_1, x'_1) \right] \quad (8.34)$$

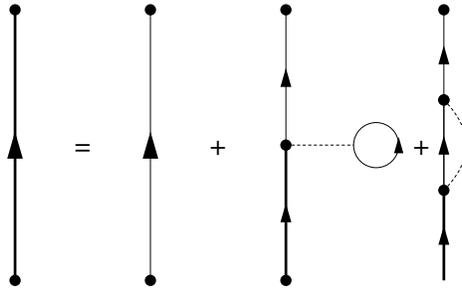


Figura 8.9: Primo ordine perturbativo della funzione di Green descritta in termini dell'equazione di Dyson.

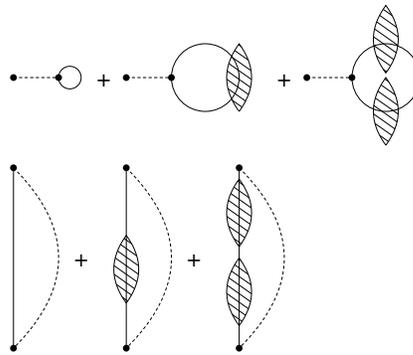


Figura 8.10: Inserimenti di autoenergia nei diagrammi della figura 8.9.

e nell'approssimazione della figura 8.11

$$\Sigma^{(II)}(x_1, x'_1) = -i \left[\delta(x_1 - x'_1) \int d^4x_2 \mathcal{V}(x_1, x_2) G(x_2, x_2) - \mathcal{V}(x_1, x'_1) G(x_1, x'_1) \right] \quad (8.35)$$

L'approssimazione di Hartree-Fock non include diagrammi come quelli presentati in figura 8.12 .

Ovviamente l'hamiltoniana H è stata separata in H_0 e H_1 e G^0 è definita rispetto agli autostati di H_0 . Se l'hamiltoniana H è indipendente dal tempo si ha che l'interazione \mathcal{V} può essere scritta come:

$$\mathcal{V}(x_1, x'_1) = V(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}'_1) \delta(t_1 - t'_1)$$

Definiamo le trasformate di Fourier

$$G(\mathbf{x}t, \mathbf{x}'t') = \frac{1}{2\pi} \int d\omega e^{-i\omega(t-t')} G(\mathbf{x}, \mathbf{x}', \omega) \quad (8.36)$$

$$G^0(\mathbf{x}t, \mathbf{x}'t') = \frac{1}{2\pi} \int d\omega e^{-i\omega(t-t')} G^0(\mathbf{x}, \mathbf{x}', \omega) \quad (8.37)$$

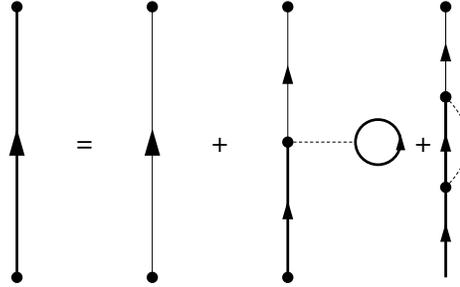


Figura 8.11: Rappresentazione diagrammatica dell'approssimazione HF nella equazione di Dyson.

$$\Sigma(\mathbf{x}t, \mathbf{x}'t') = \Sigma(\mathbf{x}, \mathbf{x}')\delta(t - t') = \frac{1}{2\pi} \int d\omega e^{-i\omega(t-t')} \Sigma(\mathbf{x}, \mathbf{x}') \quad (8.38)$$

Per le funzioni di Green in rappresentazione mista, l'equazione di Dyson diventa

$$G(\mathbf{x}, \mathbf{y}, \omega) = G^0(\mathbf{x}, \mathbf{y}, \omega) + \int d^3x_1 \int d^3x'_1 G^0(\mathbf{x}, \mathbf{x}_1, \omega) \Sigma(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}'_1) G(\mathbf{x}'_1, \mathbf{y}, \omega) \quad (8.39)$$

Nell'approssimazione II l'autoenergia diventa

$$\begin{aligned} \Sigma^{(II)}(x_1, x'_1) &= \Sigma^{(II)}(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}'_1)\delta(t - t') = -i\delta(t - t') \\ &\times \left[\delta(x_1 - x'_1) \int d^4x_2 V(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2) \frac{1}{2\pi} \int d\omega e^{-i\omega(t-t^+)} G(\mathbf{x}_2, \mathbf{x}'_2, \omega) \right. \\ &\left. - V(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}'_1) \frac{1}{2\pi} \int d\omega e^{-i\omega(t-t^+)} G(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}'_1, \omega) \right] \quad (8.40) \end{aligned}$$

Nell'equazione precedente ho indicato $t^+ > t$. Questo fatto sarà utilizzato per definire poi la funzione

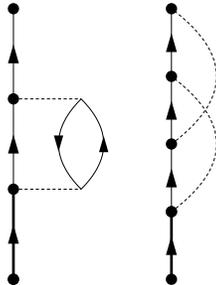


Figura 8.12: Esempio di diagrammi non inclusi nell'approssimazione di Hartree-Fock.

gradino.

Chiamiamo $\phi_j^0(\mathbf{r})$ le autofunzioni dell'hamiltoniana ad un corpo H_0

$$H_0 = \sum_j h_j \ ; \ h_j \phi_j^0(\mathbf{r}) = \left[-\frac{\nabla^2}{2m} + \mathcal{U}(\mathbf{r}) \right] \phi_j^0(\mathbf{r}) = \epsilon_j \phi_j^0(\mathbf{r}) \quad (8.41)$$

Usiamo questa base per descrivere gli operatori di campo in rappresentazione di interazione

$$\psi_{\Gamma}(\mathbf{x}, t) = \sum_k a_{\Gamma, k}(t) \phi_j^0(\mathbf{x}) \ ; \ \psi_{\Gamma}^+(\mathbf{x}, t) = \sum_k a_{\Gamma, k}^+(t) (\phi_j^0(\mathbf{x}))^* \quad (8.42)$$

Quindi

$$\begin{aligned} iG^0(\mathbf{x}t, \mathbf{x}'t') &= \langle \Phi_0 | T [\psi_{\Gamma}(\mathbf{x}, t) \psi_{\Gamma}^+(\mathbf{x}', t')] | \Phi_0 \rangle \\ &= \langle \Phi_0 | \sum_k a_k e^{-i\omega_k t} \phi_j^0(\mathbf{x}) \sum_{k'} a_{k'}^+ e^{i\omega_{k'} t'} (\phi_j^0(\mathbf{x}'))^* | \Phi_0 \rangle \\ &\quad - \langle \Phi_0 | \sum_{k'} a_{k'}^+ e^{i\omega_{k'} t'} (\phi_j^0(\mathbf{x}'))^* \sum_k a_k e^{-i\omega_k t} \phi_j^0(\mathbf{x}) | \Phi_0 \rangle \\ &= \sum_k \phi_k^0(\mathbf{x}) (\phi_k^0(\mathbf{x}'))^* e^{-i\omega_k(t-t')} [\Theta(t-t')\Theta(\omega_k - \epsilon_F) - \Theta(t'-t)\Theta(\epsilon_F - \omega_k)] \end{aligned} \quad (8.43)$$

dove ho usato

$$\langle \Phi_0 | a_k a_{k'}^+ | \Phi_0 \rangle = \delta_{k'k} \Theta(\omega_k - \epsilon_F) \ ; \ \langle \Phi_0 | a_{k'}^+ a_k | \Phi_0 \rangle = \delta_{k'k} \Theta(\epsilon_F - \omega_k) \quad (8.44)$$

Utilizzando la rappresentazione integrale di $\Theta(t-t')$, vedi l'equazione (7.43), ottengo

$$G^0(\mathbf{x}, \mathbf{x}', \omega) = \sum_k \phi_k^0(\mathbf{x}) \phi_k^{0,*}(\mathbf{x}') \left[\frac{\Theta(\epsilon_k - \epsilon_F)}{\omega - \omega_k + i\eta} + \frac{\Theta(\epsilon_F - \epsilon_k)}{\omega - \omega_k - i\eta} \right] \quad (8.45)$$

Usando le ϕ^0 ottenute dalla (8.41) posso calcolare G^0 , con la quale si può attivare un ciclo iterativo usando l'equazione di Dyson (8.39) e l'equazione per l'autoenergia (8.40).

È possibile cercare per G un'espressione analoga alla (8.45) nella quale le ϕ^0 sono sostituite con generiche ϕ autostati di una nuova hamiltoniana ad un corpo, diversa da quella delle equazioni (8.41)

$$G(\mathbf{x}, \mathbf{x}', \omega) = \sum_k \phi_k(\mathbf{x}) \phi_k^*(\mathbf{x}') \left[\frac{\Theta(\epsilon_k - \epsilon_F)}{\omega - \omega_k + i\eta} + \frac{\Theta(\epsilon_F - \epsilon_k)}{\omega - \omega_k - i\eta} \right] \quad (8.46)$$

Inserendo questa espressione nell'equazione (8.40) si incontrano integrali del tipo

$$\frac{1}{2\pi i} \int d\omega \frac{e^{i\omega|t-t^+|}}{\omega - \omega_k + i\eta} = 0 \ ; \ \frac{1}{2\pi i} \int d\omega \frac{e^{i\omega|t-t^+|}}{\omega - \omega_k - i\eta} = \Theta(-|t-t^+|) \quad (8.47)$$

quindi ottengo l'espressione

$$\begin{aligned} \Sigma^{(II)}(x_1, x'_1) &= \Sigma^{(II)}(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}'_1) \delta(t-t') \\ &= -i \left[\delta(x_1 - x'_1) \int d^3 x_2 V(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2) i \sum_k \phi_k(\mathbf{x}_2) \phi_k^*(\mathbf{x}_2) \Theta(\epsilon_F - \epsilon_k) \right. \\ &\quad \left. - i V(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}'_1) \sum_k \phi_k(\mathbf{x}_1) \phi_k^*(\mathbf{x}'_1) \Theta(\epsilon_F - \epsilon_k) \right] \\ &= \delta(x_1 - x'_1) \int d^3 x_2 V(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2) \rho(\mathbf{x}_2) - V(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}'_1) \sum_k \phi_k(\mathbf{x}_1) \phi_k^*(\mathbf{x}'_1) \Theta(\epsilon_F - \epsilon_k) \end{aligned} \quad (8.48)$$

dove ho usato l'espressione della densità per lo stato fondamentale di un sistema di particelle non interagenti

$$\rho(\mathbf{x}) = \sum_l^{\epsilon_F} \phi_k(\mathbf{x}_2) \phi_k^*(\mathbf{x}_2) \quad (8.49)$$

Definisco l'operatore

$$\mathcal{L} \equiv \omega - H_0 = \omega + \frac{\nabla^2}{2m} - \mathcal{U}(\mathbf{x}) \quad (8.50)$$

dove \mathcal{U} è un potenziale medio ad un corpo.

$$\begin{aligned} \mathcal{L} G^0(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}'_1, \omega) &= \sum_k (\omega - \epsilon_k^0) \phi_k^0(\mathbf{x}) \phi_k^{0,*}(\mathbf{x}') \left[\frac{\Theta(\epsilon_k^0 - \epsilon_F^0)}{\omega - \omega_k + i\eta} + \frac{\Theta(\epsilon_F^0 - \epsilon_k^0)}{\omega - \omega_k - i\eta} \right] \\ &= \sum_k \phi_k^0(\mathbf{x}) \phi_k^{0,*}(\mathbf{x}') [\Theta(\epsilon_k^0 - \epsilon_F^0) + \Theta(\epsilon_F^0 - \epsilon_k^0)] = \delta(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}'_1) \end{aligned} \quad (8.51)$$

dove ho utilizzato la completezza delle ϕ^0 , ed il fatto che per definizione delle energie $\omega_k = \epsilon_k^0$. L'espressione precedente indica che \mathcal{L} è l'operatore $(G^0)^{-1}$. Applico questo operatore all'equazione di Dyson

$$\begin{aligned} \mathcal{L} G(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}'_1, \omega) &= \mathcal{L} G^0(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}'_1, \omega) + \int d^3 x_2 \int d^3 x'_2 \mathcal{L} G^0(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}'_1, \omega) \Sigma(\mathbf{x}_2, \mathbf{x}'_2) G(\mathbf{x}_2, \mathbf{x}'_2, \omega) \\ &= \delta(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}'_1) + \int d^3 x'_2 \Sigma(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}'_2) G(\mathbf{x}'_2, \mathbf{x}'_1, \omega) \end{aligned} \quad (8.52)$$

Esplicitando l'operatore \mathcal{L} ottengo

$$\begin{aligned} &\left[\omega + \frac{\nabla_1^2}{2m} - \mathcal{U}(\mathbf{x}_1) \right] \sum_k \phi_k(\mathbf{x}_1) \phi_k^*(\mathbf{x}'_1) \left[\frac{\Theta(\epsilon_k - \epsilon_F)}{\omega - \omega_k + i\eta} + \frac{\Theta(\epsilon_k - \epsilon_F)}{\omega - \omega_k - i\eta} \right] \\ &= \delta(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}'_1) + \int d^3 \mathbf{x}_2 \Sigma(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) \sum_k \phi_k(\mathbf{x}_2) \phi_k^*(\mathbf{x}'_1) \left[\frac{\Theta(\epsilon_k - \epsilon_F)}{\omega - \omega_k + i\eta} + \frac{\Theta(\epsilon_F - \epsilon_k)}{\omega - \omega_k - i\eta} \right] \end{aligned} \quad (8.53)$$

Moltiplicando per $\phi_j(\mathbf{x}'_1)$ ed integrando su \mathbf{x}'_1 per l'ortonormalizzazione delle ϕ_k le somme scompaiono.

$$\begin{aligned} &\left[\omega + \frac{\nabla_1^2}{2m} - \mathcal{U}(\mathbf{x}_1) \right] \phi_j(\mathbf{x}_1) \left[\frac{\Theta(\epsilon_j - \epsilon_F)}{\omega - \omega_j + i\eta} + \frac{\Theta(\epsilon_j - \epsilon_F)}{\omega - \omega_j - i\eta} \right] \\ &= \phi_j(\mathbf{x}_1) + \int d^3 \mathbf{x}'_2 \Sigma(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}'_2) \phi_j(\mathbf{x}_2) \left[\frac{\Theta(\epsilon_j - \epsilon_F)}{\omega - \omega_j + i\eta} + \frac{\Theta(\epsilon_F - \epsilon_j)}{\omega - \omega_j - i\eta} \right] \end{aligned} \quad (8.54)$$

Moltiplicando per $\omega - \omega_j \equiv \omega - \epsilon_j$ ottengo

$$\left[-\frac{\nabla_1^2}{2m} + \mathcal{U}(\mathbf{x}_1) \right] \phi_j(\mathbf{x}_1) + \int d^3 \mathbf{x}'_2 \Sigma(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}'_2) \phi_j(\mathbf{x}_2) = \epsilon_j \phi_j(\mathbf{x}_1) \quad (8.55)$$

ed inserendo la (8.48)

$$\begin{aligned} &\left[-\frac{\nabla_1^2}{2m} + \mathcal{U}(\mathbf{x}_1) \right] \phi_j(\mathbf{x}_1) + \int d^3 \mathbf{x}'_2 V(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}'_2) \rho(\mathbf{x}_2) \phi_j(\mathbf{x}_2) \\ &- \int d^3 \mathbf{x}_2 V(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2) \sum_k \phi_k(\mathbf{x}_1) \phi_k^*(\mathbf{x}_2) \phi_j(\mathbf{x}_2) \Theta(\epsilon_F - \epsilon_k) = \epsilon_j \phi_j(\mathbf{x}_1) \end{aligned} \quad (8.56)$$

che è la tradizionale equazione di Hartree-Fock.

8.4 Equazione di Bethe-Salpeter

Il calcolo della funzione di Green in termini perturbativi usando l'equazione di Dyson come indicato nella figura 8.13 rimane finito termine per termine solo se il potenziale non è infinito. Si tratta del problema che abbiamo studiato nel Cap. 4.2 utilizzando la teoria di Brueckner.

Ogni linea sottile della figura 8.13 indica la funzione di Green G^0 , descrivibile in termini di funzioni d'onda non perturbate ϕ_k , come dato dalle equazioni (8.45) e (8.46). Questo significa che ogni intersezione tra linea tratteggiata e continua implica il prodotto $v\phi_k$ tra interazione nuda e funzione d'onda imperturbata. Come discusso nel Cap. 4.2 questo prodotto non è finito per potenziali infiniti. Usando una strategia analoga a quella usata nel Cap. 4.2 cerchiamo di costruire una interazione effettiva sommando una serie infinita di diagrammi in modo che il prodotto $v\phi_k$ sia finito.

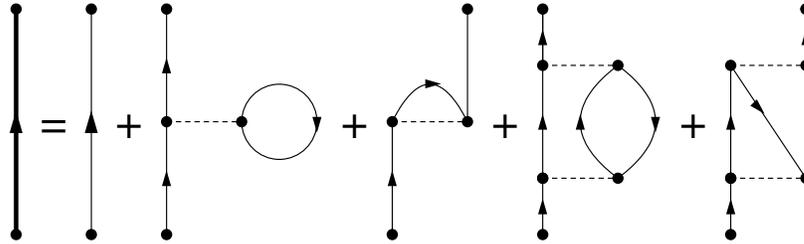


Figura 8.13:

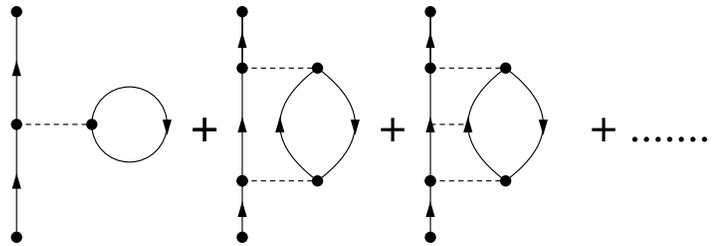


Figura 8.14:

Consideriamo tutte le interazioni che collegano le linee di particella. Questa approssimazione detta *ladder* (scala a pioli) è presentata, per i primi tre termini, nella figura 8.14. Bisogna considerare che l'approssimazione *ladder* somma fino all'infinito termini di interazione legati esclusivamente a linee di particella. Questo è necessario perchè nel processo di interazione la particella modifica il proprio stato. Se si trova al di sotto della superficie di Fermi bisogna considerare il principio di esclusione di Pauli. Per evitare questa complicazione si sceglie di lavorare solo al di sopra della superficie di Fermi dove non ci sono stati occupati.

Lavoriamo nello spazio degli impulsi e consideriamo i termini dello sviluppo perturbativo fino al secondo ordine indicati nella figura 8.15 nei termini diretti e di scambio. I termini A e B contribuiscono

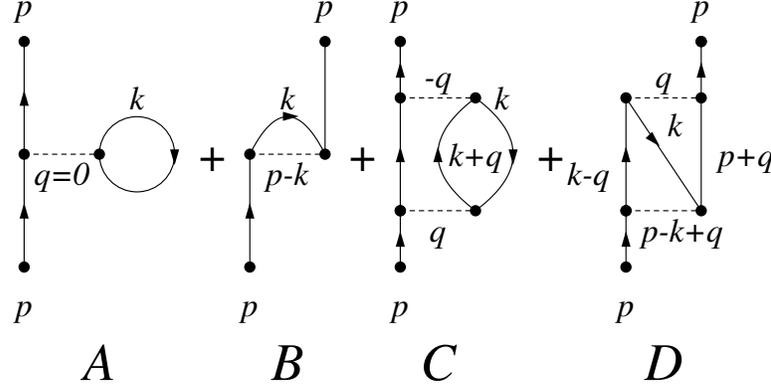


Figura 8.15:

all'autoenergia con i termini

$$\Sigma^{A,B}(p) = -2i\mathcal{V}(0)(2\pi)^{-4} \int d^4k G^0(k) e^{ik_0\eta} + i(2\pi)^{-4} \int d^4k G^0(k) \mathcal{V}(p-k) e^{ik_0\eta} \quad (8.57)$$

Ogni linea di particella che forma un circuito chiuso, o che si chiude alla stessa linea di interazione, che è equivalente, genera un termine $G^0(\mathbf{k}, \omega) e^{i\omega\eta}$ con $\eta \rightarrow 0^+$ alla fine del calcolo.

Per i termini C e D abbiamo

$$\begin{aligned} \Sigma^{C,D}(p) &= 2(2\pi)^{-8} \int d^4k G^0(k) \int d^4q \mathcal{V}(q) G^0(p-q) G^0(k+q) \mathcal{V}(q) \\ &\quad - (2\pi)^{-8} \int d^4k G^0(k) \int d^4q \mathcal{V}(q) G^0(k-q) G^0(p+q) \mathcal{V}(p-k+q) \end{aligned} \quad (8.58)$$

Considerando tutti gli ordini dello sviluppo, si ottiene l'espressione

$$\Sigma(p) = -2i(2\pi)^{-4} \int d^4k G^0(k) \Gamma(pk; pk) + i(2\pi)^{-4} \int d^4k G^0(k) \Gamma(pk; kp) \quad (8.59)$$

In questo esempio Γ include la somma su tutte le interazioni ripetute, e assume l'espressione

$$\Gamma(p_1 p_2; p_3 p_4) = \mathcal{V}(p_1 - p_3) + i(2\pi)^{-4} \int d^4q \mathcal{V}(q) G^0(p_1 - q) G^0(p_2 + q) \mathcal{V}(p_1 - q - p_3) + \dots \quad (8.60)$$

Questa somma infinita di termini, indicata nella prima riga della figura 8.16, può essere espressa in termini di equazione integrale

$$\Gamma(p_1 p_2; p_3 p_4) = \mathcal{V}(p_1 - p_3) + i(2\pi)^{-4} \int d^4q \mathcal{V}(q) G^0(p_1 - q) G^0(p_2 + q) \Gamma(p_1 - q, p_2 + q; p_3 p_4) \quad (8.61)$$

la cui rappresentazione grafica è data dalla seconda riga della figura 8.16. L'equazione (8.61) è nota come **equazione di Bethe-Salpeter**, anche se si tratta dell'approssimazione *ladder* dell'equazione di Bethe-Salpeter.

Anche questa espressione presenta prodotti tra il potenziale microscopico \mathcal{V} e la funzione di Green non interagente G^0 . Questi termini sono però moltiplicati da Γ che rende finito l'integrando.

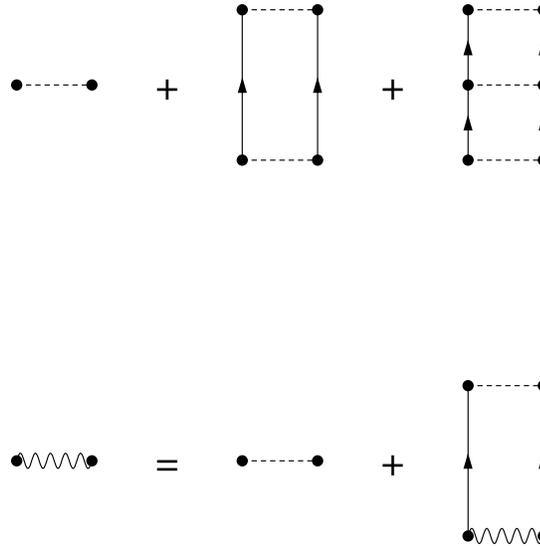


Figura 8.16:

Ho espresso l'equazione di Bethe-Salpeter in termini di G^0 , ma è possibile utilizzare una G ottenuta dal calcolo Hartee-Fock.

Ho giustificato l'uso delle sole linee di particella nel calcolo dell'interazione effettiva, per evitare l'analisi in termini di principio di esclusione di Pauli. In realtà l'approssimazione è abbastanza buona, perchè lo spazio delle configurazioni al di sopra della superficie di Fermi è molto più grande di quello al di sotto. È possibile dimostrare che i termini dello sviluppo sono legati a diverse potenze della densità del sistema. Questo significa che tutto il processo è tanto più valido quanto meno denso è il sistema.

8.5 La teoria Random Phase Approximation (RPA)

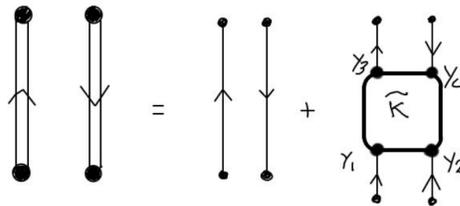


Figura 8.17: Rappresentazione grafica dell'equazione (8.62).

È possibile formulare un'equazione simile all'equazione di Dyson per la funzione di Green ad un corpo anche per la funzione di Green a due corpi. In questa sezione ci occuperemo solo delle funzioni di Green a due corpi che descrivono l'evoluzione temporale di una coppia particella-buca. Per questa situazione

l'equazione, analoga a quella di Dyson è:

$$G(x_1, x_2, x_3, x_4) = G^0(x_1, x_2, x_3, x_4) + \int d^4 y_1 d^4 y_2 d^4 y_3 d^4 y_4 G^0(x_1, x_2, y_1, y_2) \tilde{\mathcal{K}}(y_1, y_2, y_3, y_4) G^0(y_3, y_4, x_3, x_4) \quad (8.62)$$

dove il termine $\tilde{\mathcal{K}}$ contiene tutti i diagrammi connessi che possono essere inseriti tra la linea di particella e quella di buca.

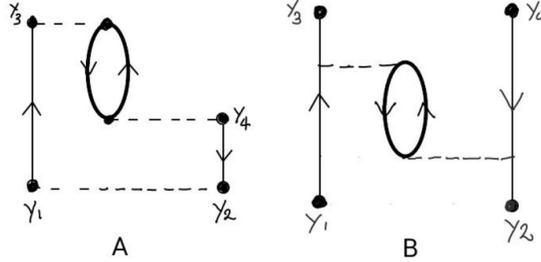


Figura 8.18: Il diagramma A è improprio, riducibile, mentre il diagramma B è proprio, irriducibile.

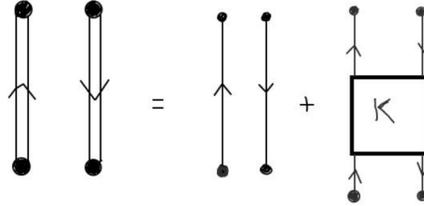


Figura 8.19: Rappresentazione grafica dell'equazione (8.63).

Anche in questo caso si possono definire diagrammi impropri, o riducibili, e propri, o irriducibili. Esempi di questi due tipi di diagrammi sono presentati nella figura 8.18. Il diagramma A è improprio, riducibile, perchè è possibile tagliare le linee di particella e di buca esterne generando due diagrammi presenti nello sviluppo perturbativo della funzione di Green a due corpi. Al contrario questo non è possibile per il diagramma B. Considerando l'inserimento di soli diagrammi propri, irriducibili, l'equazione (8.62) può essere, formalmente, riscritta come

$$G(x_1, x_2, x_3, x_4) = G^0(x_1, x_2, x_3, x_4) + \int d^4 y_1 d^4 y_2 d^4 y_3 d^4 y_4 G^0(x_1, x_2, y_1, y_2) \mathcal{K}(y_1, y_2, y_3, y_4) G^0(y_3, y_4, x_3, x_4) \quad (8.63)$$

dove il kernel \mathcal{K} indica l'inserimento di tutti i diagrammi irriducibili.

L'approssimazione Random Phase Approximation (RPA) consiste nel considerare, nell'equazione precedente, al posto del kernel \mathcal{K} semplicemente l'interazione \mathcal{V} che dipende solo da due coordinate.

$$\mathcal{K}^{\text{RPA}}(y_1, y_2, y_3, y_4) = \mathcal{V}(y_1, y_4) [\delta(y_1 - y_2) \delta(y_3 - y_4) - \delta(y_1 - y_3) \delta(y_2 - y_4)] \quad (8.64)$$

quindi

$$G^{\text{RPA}}(x_1, x_2, x_3, x_4) = G^0(x_1, x_2, x_3, x_4)$$

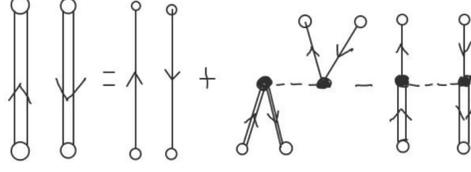


Figura 8.20:

$$\begin{aligned}
& + \int d^4 y_1 d^4 y_2 G^0(x_1, x_2, y_1, y_1) \mathcal{V}(y_1, y_2) G^{\text{RPA}}(y_2, y_2, x_3, x_4) \\
& - \int d^4 y_1 d^4 y_2 G^0(x_1, x_2, y_1, y_2) \mathcal{V}(y_1, y_2) G^{\text{RPA}}(y_3, y_4, x_3, x_4) \quad (8.65)
\end{aligned}$$

dove ho separato il termine diretto e di scambio. La rappresentazione grafica dei diagrammi presenti nell'approssimazione RPA è data nella figura 8.20.

Considero l'espressione della funzione di Green a due corpi in rappresentazione di Lehmann, Eq. (7.86). Poiché $|\Psi_n\rangle$ e $\langle\Psi_n|$ indicano lo stesso stato eccitato, i termini

$$\langle\Psi_0|a_{k_1}a_{k_2}^+|\Psi_n\rangle\langle\Psi_n|a_{k_3}a_{k_4}^+|\Psi_0\rangle$$

implicano

$$\delta_{k_2, k_3} \theta(k_2 - k_F) \delta_{k_4, k_1} \theta(k_4 - k_F)$$

Per questo motivo è possibile definire le trasformate di Fourier della funzione di Green a due corpi, e del kernel di interazione, che dipendono esclusivamente da due impulsi

$$G(x_1, x_2, x_3, x_4) = (2\pi)^{-8} \int d^4 k_1 d^4 k_2 e^{-ik_1(x_1-x_4)} e^{ik_2(x_2-x_3)} G(k_1, k_2) \quad (8.66)$$

$$\mathcal{K}(x_1, x_2, x_3, x_4) = (2\pi)^{-8} \int d^4 k_1 d^4 k_2 e^{-ik_1(x_1-x_4)} e^{ik_2(x_2-x_3)} \mathcal{K}(k_1, k_2) \quad (8.67)$$

Inserendo queste due definizioni nell'equazione (8.63) ed utilizzando l'ipotesi RPA 8.65 sul kernel, si ottiene l'espressione per l'equazione di Dyson in RPA espressa nello spazio dei momenti. Un calcolo laborioso, anche se non presenta alcuna difficoltà, mostra che **considerando solo il termine diretto** della (8.65) l'equazione assume un aspetto puramente algebrico

$$G^{\text{RPA,D}}(k_1, k_2) = G^0(k_1, k_2) \mathcal{V}(k_1 - k_2 = q) G^{\text{RPA,D}}(k_1, k_2) \quad (8.68)$$

Sviluppando un calcolo analogo per il termine di scambio, si vede che **non può essere fattorizzato** in una semplice espressione algebrica.

Considerando quindi il solo termine diretto, approssimazione detta dei diagrammi ad anello (ring diagrams), si ha che

$$G^{\text{RPA,D}}(k_1, k_1 + q) = G^0(k_1, k_1 + q) \mathcal{V}(q) G^{\text{RPA,D}}(k_1, k_1 + q) \quad (8.69)$$

$$G^{\text{RPA,D}}(k_1, k_1 + q) [1 - G^0(k_1, k_1 + q) \mathcal{V}(q)] = G^0(k_1, k_1 + q) \quad (8.70)$$

$$G^{\text{RPA,D}}(k_1, k_1 + q) = \frac{G^0(k_1, k_1 + q)}{1 - G^0(k_1, k_1 + q) \mathcal{V}(q)} \quad (8.71)$$

Questa espressione è comunemente utilizzata per calcolare la risposta lineare in sistemi fermionici infiniti.

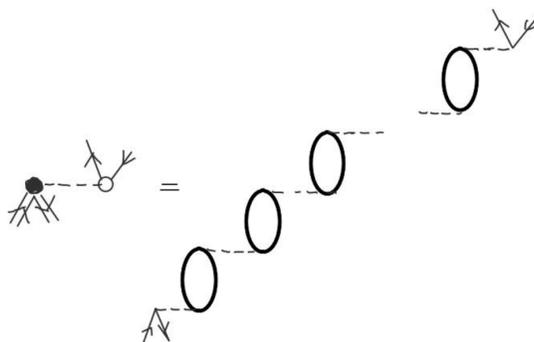


Figura 8.21: Rappresentazione grafica della RPA in approssimazione dei diagrammi ad anello.

Appendice A

Operatori di creazione e distruzione nel modello a Shell

Questo paragrafo riguarda la definizione degli operatori di creazione di distruzione nel caso specifico in cui si voglia utilizzare una descrizione basata sulla simmetria sferica del problema.

La tematica è piuttosto specialistica e non verrà ripresa nelle parti successive. Il lettore non interessato a questo problema può tranquillamente passare ai paragrafi successivi senza comprometterne la comprensione.

Nel caso di un'hamiltoniana di singola particella che gode di simmetria sferica, i numeri quantici che caratterizzano gli stati sono: il numero quantico principale n , il momento angolare orbitale l , il momento angolare totale j e anche m , la proiezione di j sull'asse di quantizzazione z (abbiamo ipotizzato una descrizione in cui l'accoppiamento tra momenti angolari e spin avviene nello schema jj). Nel seguito supporrò sottintesi n e l .

L'azione degli operatori di creazione sarà:

$$a_{j,m}^+ |0\rangle = |jm\rangle \quad (\text{A.1})$$

che indica che l'operatore $a_{j,m}^+$ crea una particella sul livello $|jm\rangle$. Il livello j è $2j + 1$ volte degenere, per questo motivo è necessario specificare anche m .

Le $2j + 1$ componenti di $a_{j,m}^+$ si comportano in modo tale da formare un tensore sferico irriducibile che soddisfa le equazioni:

$$[J_z, a_{j,m}^+] = m a_{j,m}^+ \quad (\text{A.2})$$

$$[J_{\pm}, a_{j,m}^+] = [j(j+1) - m(m \pm 1)]^{1/2} a_{j,m \pm 1}^+ \quad (\text{A.3})$$

dove abbiamo indicato con J_{\pm} e J_z le componenti sferiche del momento angolare generalizzato del sistema.

L'equazione che trasforma le componenti di un tensore sferico irriducibile in quelle del suo hermitiano è:

$$(T_q^k)^+ = (T_{-q}^k) (-)^q. \quad (\text{A.4})$$

Questo significa che l'aggiunto di $a_{j,m}^+$, $a_{j,m}$, non è componente di un tensore sferico irriducibile, ma lo è invece

$$\tilde{a}_{j,m} = (-)^{j+m} a_{j,-m} \quad (\text{A.5})$$

Nei sistemi a invarianza rotazionale è molto conveniente lavorare con operatori che si comportano come tensori sferici irriducibili, quindi si preferisce utilizzare $\tilde{a}_{j,m}$ al posto di $a_{j,m}$. Le proprietà di

anticommutazione sono:

$$\{a_{j,m}^+, a_{j,m'}^+\} = 0 \quad \{\tilde{a}_{j,m}, \tilde{a}_{j',m'}\} = 0 \quad (\text{A.6})$$

$$\{\tilde{a}_{j,m}, a_{j',m'}^+\} = (-)^{j+m} \delta_{j,j'} \delta_{-m,m'} \quad (\text{A.7})$$

Si può creare uno stato di N particelle applicando successivamente $a_{j,m}^+$ al vuoto e utilizzando le regole di accoppiamento dei momenti angolari. Per esempio l'operatore di creazione di due particelle diventa:

$$A^+(j_1 j_2; JM) = \frac{1}{(1 + \delta_{j_1 j_2})^{1/2}} [a_{j_1}^+ \otimes a_{j_2}^+]_M^J \quad (\text{A.8})$$

dove abbiamo definito:

$$[a_{j_1}^+ \otimes a_{j_2}^+]_M^J = \sum_{m_1 m_2} \langle j_1 m_1 j_2 m_2 | JM \rangle a_{j_1, m_1}^+ a_{j_2, m_2}^+ \quad (\text{A.9})$$

in cui abbiamo indicato con $\langle j_1 m_1 j_2 m_2 | JM \rangle$ il coefficiente di Clebsch Gordan. L'operatore di distruzione di una coppia di particelle diventa:

$$\tilde{A}(j_1 j_2; JM) = (-)^{J+M} [A^+(j_1 j_2; J - M)]^+ = -\frac{1}{(1 + \delta_{j_1 j_2})^{1/2}} [\tilde{a}_{j_1} \otimes \tilde{a}_{j_2}]_M^J \quad (\text{A.10})$$

e l'operatore di creazione di una coppia particella-buca è:

$$U(j_1 j_2 JM) = [a_{j_1}^+ \otimes \tilde{a}_{j_2}]_M^J \quad (\text{A.11})$$

Nel caso $j_1 = j_2$, le due particelle sono distinte da $m_1 \neq m_2$ quindi, dato che le equazioni precedenti comprendono una somma sulle componenti m_1 e m_2 bisogna dividere per $\sqrt{2}$ dato che si contano due volte configurazioni indistinguibili. Ad esempio la configurazione in cui la terza componente della particella 1 è m_1 e quella della particella 2 è m_2 , è identica a quella in cui la terza componente della particella 1 è m_2 e quella della particella 2 è con m_1 .

Bibliografia

- [Abr75] A. A. Abrikosov, L. P. Gorkov and I. E. Dzyaloshinski, *Methods of quantum field theory in statistical physics*, Dover, New York (1975).
- [Fet71] A. L. Fetter and J. D. Walecka, *Quantum theory of many-particle systems*, Mc Graw-Hill, New York (1971), anche Dover, New York (2003).
- [Gro91] E. K. U. Gross, E. Runge and O. Heinonen, *Many-particle theory*, Adam Hilger, Bristol (1991).
- [Mar67] N. H. March, W. H. Young and S. Sampanthar, *The many-body problem in quantum mechanics*, Cambridge University Press, Cambridge (1967), anche, Dover, New York (1995).
- [Mat67] R. D. Mattuck, *A guide to Feynmann diagrams in the many-body problem*, Mc Graw-Hill, New York (1967), anche Dover, New York (1992).
- [Mes61] A. Messiah, *Quantum Mechanics*, North Holland, Amsterdam (1961), anche, Dover, New York (2014).