



Istituto Nazionale di Fisica Nucleare
SEZIONE DI LECCE

Molti Corpi in Meccanica Quantistica

Giampaolo Co'

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

Premessa

Queste note sono concepite per presentare il problema della descrizione di sistemi composti da molti-corpi in Meccanica Quantistica. Il pubblico a cui sono indirizzate è quello degli studenti della Laurea Magistrale del corso di Fisica. Mi rivolgo, quindi, a lettori che conoscono i principi e le tecniche di base della Meccanica Quantistica non-relativistica, con lo scopo di mostrare loro come applicare queste conoscenze ad un problema ben preciso, quello della descrizione di sistemi composti da particelle identiche, principalmente fermioni. Darò per scontate conoscenze come la soluzione dell'equazione di Schrödinger per una singola particella in un potenziale, la quantizzazione dei momenti angolari e le conseguenti regole per sommarli, la trattazione delle particelle identiche, la loro classificazione in bosoni e fermioni, e le statistiche quantistiche che ne conseguono.

In queste note, i calcoli sono sviluppati con un certo dettaglio per permettere di verificare i risultati e per mostrare al lettore applicazioni delle tecniche acquisite nei corsi di matematica e fisica di base della Laurea Triennale in Fisica.

L'attenzione è focalizzata alla descrizione della teoria, mentre ho limitato la presentazione dei risultati acquisiti in applicazioni a casi realistici. Questo perché questi ultimi sono in continuo progresso, ed una informazione aggiornata può essere acquisita consultando articoli di rassegna. Al contrario, la formulazione delle teorie è, ormai, ben consolidata e può essere oggetto di una presentazione manualistica.

Giampaolo Co'
Lecce Sett. 2016

In questa versione aggiornata ho corretto vari errori di scrittura trovati soprattutto nelle formule, ho unificato la notazione dei vari capitoli, eliminato parti ripetute, e ho aggiunto una Introduzione.

Giampaolo Co'
Lecce Sett. 2017

Ci sono modifiche essenziali nella presentazione della teoria di Landau dei liquidi fermionici.

Giampaolo Co'
Lecce Ott. 2018

Indice

1	Introduzione	3
I	Informazioni di base	5
2	Modelli a campo medio	7
2.1	Proprietà generali	7
2.2	Simmetria sferica	8
2.2.1	Termine di spin-orbita	12
2.3	Simmetria traslazionale	14
3	Interazioni	21
3.1	Introduzione	21
3.2	Gas di elettroni	21
3.3	Nuclei	22
3.3.1	Potenziali fenomenologici	24
3.3.2	Potenziali a scambio mesonico	26
3.3.3	Potenziali da teorie effettive chirali	27
3.3.4	Forze a tre corpi	28
3.4	Liquidi e gas fortemente interagenti	29
II	Soluzioni senza approssimazioni	33
4	Tecniche Monte Carlo	35
4.1	Integrazioni Numeriche	35
4.2	Monte Carlo Variazionale (VMC)	37
4.3	Green Function Monte Carlo (GFMC)	40
III	Teorie ispirate alla Teoria dei Campi	45
5	Rappresentazione dei numeri di occupazione	47
5.1	Determinanti di Slater	47
5.2	Operatori di creazione e di distruzione	48
5.3	Operatori ad uno o a due corpi	51
5.4	Operatori di campo	52

6	Teoria perturbativa dei sistemi a molti corpi	55
6.1	Rappresentazioni	55
6.2	Operatore di evoluzione temporale	58
6.3	Teorema di Wick	60
6.4	Accensione adiabatica dell'interazione	62
7	Teorema di Goldstone	65
7.1	Diagrammi di Goldstone	65
7.2	Teorema di Goldstone	67
8	Teoria di Brueckner	75
8.1	Introduzione	75
8.2	L'equazione di Bethe-Goldstone	76
8.3	La somma dei diagrammi a scala (ladder diagrams)	77
8.4	Il confronto con l'equazione di Lipmann-Schwinger	82
8.5	Applicazione alla materia nucleare	84
8.6	Considerazioni finali	86
9	Applicazioni del principio variazionale	87
9.1	Introduzione	87
9.2	Hartree-Fock	87
9.2.1	Hamiltoniana Hartee-Fock	87
9.2.2	Equazioni di Hartree-Fock	90
9.2.3	Hartree-Fock nel gas di Fermi	92
9.3	Teoria del funzionale densità (DFT)	93
9.3.1	Teorema di Hoenberg-Kohn	94
9.3.2	Equazioni di Khon e Sham	97
9.4	Densità e funzioni d'onda di singola particella	98
10	Funzioni di Green	103
10.1	Funzioni di Green ad un corpo	103
10.1.1	Sistema di fermioni non interagenti	107
10.1.2	Rappresentazione di Lehman	109
10.1.3	Interpretazione fisica	111
10.2	Funzione di Green a due corpi	112
10.2.1	Rappresentazione di Lehmann	113
10.3	Risposta lineare	114
10.4	Equazioni del moto	116
11	Descrizione perturbativa della funzione di Green	119
11.1	Diagrammi di Goldstone-Feynmann	121
11.2	Equazione di Dyson e Autoenergia	123
11.3	Hartree - Fock	128
11.4	Equazione di Bethe-Salpeter	132
11.5	La teoria Random Phase Approximation (RPA)	134

IV	Teorie ispirate alla Meccanica Statistica	139
12	Teoria della base correlata (CBF)	141
12.1	Introduzione	141
12.2	Bosoni	142
12.3	Fermioni	150
12.3.1	Materia nucleare infinita	158
V	Teorie fenomenologiche	161
13	Teorie effettive	163
14	Teoria dei liquidi di Fermi	165
14.1	Introduzione	165
14.2	Continuità adiabatica	165
14.3	Il concetto di quasi-particella	166
14.4	Proprietà all'equilibrio	169
14.4.1	Massa effettiva e calore specifico	169
14.4.2	Velocità del suono e compressibilità	170
14.4.3	Suscettibilità magnetica	173
14.5	Eccitazioni	175
14.5.1	Equazione di trasporto	175
14.5.2	Equazione di continuità	177
14.5.3	Eccitazioni collettive	178
VI	Appendici	183
A	Particelle identiche	185
A.1	Il caso di due particelle	185
A.2	Il caso di tre particelle	187
A.3	Generalizzazione a N particelle	188
A.4	Postulato di simmetrizzazione	189
A.5	Diffusione tra due particelle identiche	190
A.6	Particelle non interagenti	191
B	Principio variazionale	193
C	Operatori di creazione e distruzione nel modello a Shell	195
D	Velocità del suono nei fluidi	197
D.1	Equazione di continuità	197
D.2	Equazione di Eulero	198
D.3	Velocità del suono	198
E	Equazione di Boltzmann	201
F	Sigle	205
G	Simboli	207

INDICE

1

Bibliografia

209

Capitolo 1

Introduzione

L'attuale visione dell'universo da parte dei fisici riduce ogni fenomeno naturale all'interazione di sei leptoni con sei quark mediata da quattro forze fondamentali: gravitazionale, elettromagnetica, nucleare forte e nucleare debole. Questo quadro così sintetico e potente è il risultato di una ricerca ispirata al riduzionismo più estremo: la comprensione di un sistema complicato passa attraverso l'individuazione delle sue componenti e delle loro interazioni. La decomposizione di un sistema complesso in parti più piccole è un compito più semplice di quello di ricostruire, o costruire *ex-novo*, un sistema complesso partendo dalle sue componenti. La descrizione di un sistema complesso in termini delle sue componenti fondamentali è lo scopo delle teorie a multicorpi. Per svolgere questo compito è prioritario definire l'ambito teorico che si intende utilizzare, i gradi di libertà fondamentali, cioè le componenti del sistema, e la loro interazione.

L'ambito teorico può essere quello della Fisica Classica, della Meccanica Quantistica non Relativistica o della Teoria Quantistica dei Campi. È evidente che la scelta è strettamente legata al tipo di sistema che si vuole descrivere. La descrizione di un sistema planetario in termini di Teoria Quantistica dei Campi non sarebbe per nulla conveniente, così come sarebbe difficile usare la Fisica Classica per la descrizione di un barione in termini di contenuto di quark e antiquark. Nella tradizione attuale, quando si parla di teorie a multicorpi ci si riferisce alle teorie sviluppate nell'ambito della Meccanica Quantistica non Relativistica. Dal punto di vista pragmatico, questo significa che il Problema a Multicorpi consiste nel risolvere l'equazione di Schrödinger che descrive il sistema. L'uso della Meccanica Quantistica non Relativistica è limitato a quei fenomeni microscopici nei quali le energie in gioco sono molto più piccole delle masse a riposo dei sistemi considerati. Quindi si parla di atomi, molecole, liquidi quantistici, cristalli, e anche di nuclei atomici, che d'ora poi chiamerò semplicemente nuclei.

Il secondo punto da definire è quello dei gradi di libertà fondamentali, dove ho indicato con questo nome le particelle che compongono il sistema. Anche in questo caso la scelta è legata ad un principio di economia nella descrizione del sistema. Come ho già detto oggi si considerano particelle fondamentali, cioè prive di una struttura interna, solo leptoni, quark, le particelle mediatrici delle quattro forze fondamentali, ed il bosone di Higgs. Anche se corretto dal punto di vista fondamentale, risulta essere poco accorto, dal punto di vista di una descrizione sintetica del problema, usare questi gradi di libertà per qualsiasi sistema microscopico a molti corpi. Per ogni sistema è quindi necessario individuare quali sono quelle strutture delle quali si può trascurare la struttura interna e comunque ottenere una descrizione che non trascuri la fenomenologia essenziale. Ad esempio, la struttura di un nucleo viene studiata considerando come particelle fondamentali i nucleoni, cioè protoni e neutroni, che a loro volta sono composti da quark, antiquark e gluoni. In maniera analoga, la fenomenologia dell'elio liquido viene studiata considerando fondamentali gli atomi di elio, trascurandone quindi la loro struttura interna.

Il terzo punto da definire, l'interazione tra i gradi di libertà microscopici è strettamente legato al secondo, la scelta delle particelle fondamentali da usare per la descrizione del sistema. La discussione del

legame tra gradi di libertà, particelle, fondamentali e la loro interazione è discussa ampiamente nel Cap. 3, dove faccio riferimento a specifici sistemi a molticorpi.

Una volta scelti ambito teorico, gradi di libertà fondamentali e la loro mutua interazione, il problema a molticorpi è ben definito dal punto di vista fisico, e non rimane che da risolvere le equazioni differenziali, o integro-differenziali, che lo contraddistinguono. Nel caso di nostro interesse si tratta di risolvere l'equazione di Schrödinger a molticorpi. Formalmente, si tratta di una questione puramente tecnica. In realtà il problema è risolubile senza approssimazioni solo per un limitato numero di casi. È quindi necessario formulare delle approssimazioni che semplifichino il problema. Lo sviluppo di queste approssimazioni, la loro validità, la possibilità di controllarle, e di migliorarle a piacere secondo la necessità, sono gli argomenti delle teorie a molticorpi. Per fare questo è necessario investigare il problema in dettaglio, capire le relazioni tra le entità fisiche che vengono utilizzate in modo da identificare ciò che è rilevante e, se possibile, separarlo da ciò che è trascurabile. Un problema, che formalmente è puramente tecnico, spinge allo studio delle caratteristiche fisiche del sistema a molticorpi in termini delle sue componenti.

L'evidenza empirica essenziale dei sistemi a molticorpi è che le interazioni presentano alcune caratteristiche comuni sia che si parli di forze tra nucleoni, tra atomi o tra molecole. Per questo motivo, le tecniche approssimate per la soluzione dell'equazione di Schrödinger a molticorpi, sono, di fatto, indipendenti dal tipo di sistema considerato. Si tratta di tecniche universali che producono risultati applicabili senza ulteriori ipotesi allo specifico sistema sotto indagine, dal nucleo all'atomo, alla molecola, al fluido quantistico al gas di elettroni al cristallo, in generale, ad ogni sistema microscopico composto da molte particelle. L'unico fatto discriminante nella struttura delle particelle identiche riguarda la loro natura fermionica o bosonica. Al di là questa caratteristica, comunque estremamente importante, le teorie sviluppate hanno regimi di validità che si estendono su 6 ordini di grandezza per il raggio di interazione, dal nano al femto metro, e circa 12 in energia, dal meV al GeV.

Come si vedrà, il modo di affrontare il problema a molticorpi non è univoco ma utilizza diversi approcci. La visione più diffusa è quella ispirata alla Teoria Quantistica dei Campi, per quanto riguarda le tecniche ma soprattutto per quanto riguarda il linguaggio. Esiste una visione alternativa, meno diffusa, ispirata alla meccanica statistica. Come al solito, affrontare un problema da prospettive differenti permette di comprenderne meglio i vari aspetti, enfatizzati in maniera diversa da ogni specifica visione. C'è anche un approccio fenomenologico al problema in cui le proprietà fisiche delle particelle che formano il sistema, e, conseguentemente, la loro interazione, vengono modificate in modo da formulare un problema tecnicamente più semplice da risolvere.

Parte I

Informazioni di base

Capitolo 2

Modelli a campo medio

2.1 Proprietà generali

Il modello a campo medio è il punto di partenza dal quale evolvono tutte le teorie a molticorpi, è anche l'approccio del problema più semplice da risolvere poiché attua un'approssimazione che trasforma il problema a molticorpi in molti problemi ad un corpo.

Un'espressione molto generale che descrive il sistema a molticorpi è

$$H = \sum_{i=1}^A \left(-\frac{\hbar^2}{2m_i} \nabla_i^2 + V_0(i) \right) + \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^A V(i,j) + \dots, \quad (2.1)$$

dove A indica il numero di particelle ognuna 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. Ho indicato con i puntini la possibilità che esistano termini più complessi dell'interazione tra le particelle, possibilità che sarà discussa nel Capitolo 3, ma che al momento trascureremo.

Consideriamo, ad esempio, il caso di un sistema atomico, o molecolare, e che le particelle descritte dall'hamiltoniana (2.1) siano gli elettroni del sistema. In questo caso, il potenziale $V_0(i)$ è quello generato dal nucleo, quindi

$$V_0(i) = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{Z}{r_i}, \quad (2.2)$$

dove ϵ_0 è la permeabilità nel vuoto, r_i è la distanza tra la posizione dell'elettrone e quella del nucleo, e Z rappresenta il numero di protoni che compongono il nucleo, quindi il numero atomico, che corrisponde al numero di elettroni. Il potenziale di interazione tra due elettroni è

$$V(i,j) = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{r_{ij}}, \quad (2.3)$$

dove $r_{ij} = |\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|$ è la distanza tra i due elettroni. Ovviamente nel caso atomico si ha nell'espressione (2.1) $Z = A$.

Nel caso di un nucleo si ha

$$V_0(i) = 0, \quad (2.4)$$

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

Aggiungiamo e sottraiamo all'espressione (2.1) un termine di potenziale medio $U(i)$ che agisce su una particella, l' i -esima, alla volta:

$$H = \underbrace{\sum_i^A \left(-\frac{\hbar^2}{2m_i} \nabla_i^2 + V_0(i) + U(i) \right)}_{H_0} + \underbrace{\frac{1}{2} \sum_{i,j}^A V(i,j) - \sum_i^A U(i)}_{H_1} . \quad (2.5)$$

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 $h(i)$,

$$H_0 = \sum_i h(i) = \sum_i^A \left(-\frac{\hbar^2}{2m_i} \nabla_i^2 + V_0(i) + U(i) \right) . \quad (2.6)$$

Il modello a campo medio consiste nel trascurare nell'espressione (2.5) 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 $h(i)$

$$h(i)|\phi_i\rangle = \epsilon_i|\phi_i\rangle , \quad (2.7)$$

e quindi

$$H_0|\Phi\rangle = \left(\sum_i h(i) \right) |\Phi\rangle = \mathcal{E}|\Phi\rangle , \quad (2.8)$$

dove

$$|\Phi\rangle = |\phi_1\rangle|\phi_2\rangle \cdots |\phi_A\rangle . \quad (2.9)$$

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. Questa soluzione è detta determinante di Slater

$$|\Phi\rangle = \frac{1}{\sqrt{A!}} \det\{\phi_i\} . \quad (2.10)$$

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

$$U(r) = \frac{-U_0}{1 + \exp\left(\frac{r-R}{a}\right)} \quad (2.11)$$

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

2.2 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 (2.7).

Atomi e nuclei sono sistemi che vengono ben descritti considerando un sistema di coordinate posizionato al centro del nucleo atomico, e la simmetria sferica del potenziale implica $U(\mathbf{r}) = U(r)$, dove ho indicato $r = |\mathbf{r}|$. È conveniente cercare delle soluzioni del tipo

$$\phi(\mathbf{r}) = \sum_{n,l,\mu,\sigma} R_{nl}(r) Y_{l\mu}(\Omega) \chi_\sigma , \quad (2.12)$$

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

$$\chi_{1/2} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} ; \chi_{-1/2} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} . \quad (2.13)$$

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 ,

$$\left[\frac{p_r^2}{2m} + \frac{l(l+1)\hbar^2}{2mr^2} + U(r) - \epsilon_{nl} \right] [R_{nl}(r)Y_{l\mu}(\Omega)\chi_\sigma] = 0 , \quad (2.14)$$

dove l'espressione dell'operatore p_r^2 è

$$p_r^2 R_{nl}(r) = -\hbar^2 \frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{d}{dr} R_{nl}(r) \right) = -\hbar^2 \left(\frac{d^2}{dr^2} R_{nl}(r) + \frac{2}{r} \frac{d}{dr} R_{nl}(r) \right) . \quad (2.15)$$

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

$$\frac{d^2}{dr^2} R_{nl}(r) + \frac{2}{r} \frac{d}{dr} R_{nl}(r) + \left[\frac{2m}{\hbar^2} (\epsilon_{nl} - U(r)) - \frac{l(l+1)}{r^2} \right] R_{nl}(r) = 0 . \quad (2.16)$$

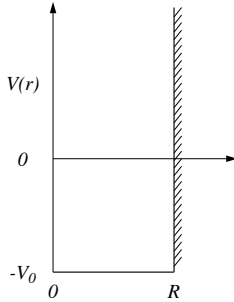


Figura 2.1: Potenziale a buca infinita.

Questa tecnica di sviluppo in armoniche sferiche della funzione d'onda, è valida per ogni potenziale che dipenda solo da r . Il risultato della sua applicazione è la riduzione del problema del risolvere un'equazione differenziale in tre dimensioni a quello della soluzione di un'equazione differenziale ad una dimensione. Solo dopo aver ottenuto l'espressione (2.16) 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 un sistema di dimensioni R . Il potenziale è

$$U(r) = -V_0 \text{ per } r \leq R \text{ e } U(r) = \infty \text{ per } r > R \quad (2.17)$$

come mostrato nella Figura 2.3. L'equazione (2.16) è definita solo nell'intervallo $0 \leq r \leq R$.

Definiamo

$$k^2 = \frac{2m}{\hbar^2} (\epsilon_{nl} + V_0) \quad (2.18)$$

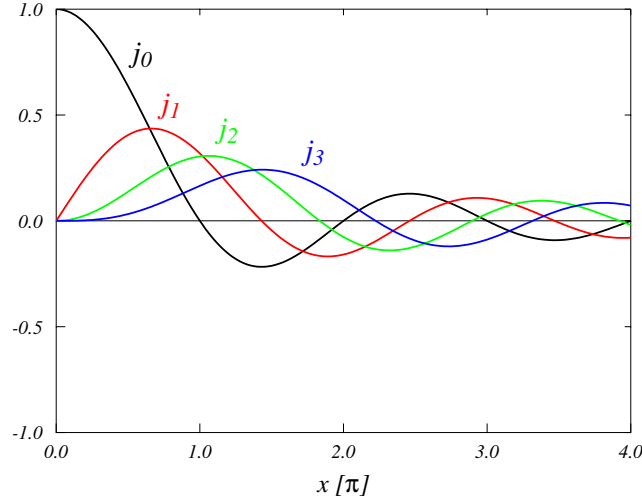


Figura 2.2: Prime quattro funzioni di Bessel sferiche.

e dividiamo la (2.16) per k^2 . Possiamo riscrivere questa equazione come dipendente dalla variabile $\rho = kr$

$$\frac{d^2}{d\rho^2} R_{nl}(\rho) + \frac{2}{\rho} \frac{d}{d\rho} R_{nl}(\rho) + \left[1 - \frac{l(l+1)}{\rho^2} \right] R_{nl}(\rho) = 0 . \quad (2.19)$$

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

$$j_0(\rho) = \frac{\sin \rho}{\rho} ; \quad j_1(\rho) = \frac{\sin \rho}{\rho^2} - \frac{\cos \rho}{\rho} , \quad (2.20)$$

ed è valida la relazione di ricorrenza

$$(2l+1)j_l(\rho) = \rho [j_{l+1}(\rho) + j_{l-1}(\rho)] , \quad (2.21)$$

per $l > 0$.

Dal punto di vista fisico, poiché il potenziale tende all'infinito per $r \geq R$, è necessario che j_j 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

$$\frac{2m}{\hbar^2} (\epsilon_{nl} + V_0) R^2 = X_{nl}^2 ; \quad \epsilon_{nl} = \frac{\hbar^2}{2m} \frac{X_{nl}^2}{R^2} - V_0 . \quad (2.22)$$

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 (2.22) che, in questo caso, tutti gli autovalori dell'energia sono discreti.

B. Oscillatore armonico a tre dimensioni

In questo caso il potenziale è

$$U(r) = \frac{1}{2}m\omega^2 r^2 . \quad (2.23)$$

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

$$\epsilon_{nl} = \hbar\omega \left(N + \frac{3}{2} \right) = \hbar\omega \left(N_x + N_y + N_z + \frac{3}{2} \right) = \hbar\omega \left(2(n-1) + l + \frac{3}{2} \right) . \quad (2.24)$$

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 dalla 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	+1
3	2	1	2p	1 3	-1

Tabella 2.1: Esempio di combinazione di numeri quantici che producono lo stesso valore dell'energia (2.24). 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 2.1 presento una lista di valori dei numeri quantici che producono lo stesso valore dell'energia (2.24). 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 il 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

$$\lim_{r_i \rightarrow 0} V_0(i) + U(i) = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{Z}{r_i} , \quad (2.25)$$

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

$$\lim_{r_i \rightarrow \infty} V_0(i) + U(i) = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{Z - (N - 1)}{r_i} . \quad (2.26)$$

Il puro potenziale Coulombiano

$$V(r) = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{Z}{r} , \quad (2.27)$$

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

$$\epsilon_n = -\frac{1}{2}mc^2 \frac{(Z\alpha)^2}{n^2} , \quad (2.28)$$

dove α è la costante di struttura fine

$$\alpha = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 \hbar c} \simeq \frac{1}{137} , \quad (2.29)$$

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	2	1	2p	3	2
ϵ_2	2	0	2s	3	1	3p	3	2
ϵ_3	3	0	3s					

Tabella 2.2: 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 2.2 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.

2.2.1 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 fatto è sempre stato evidente nell'ambito della fisica atomica, ma nell'ambito della fisica nucleare è stato compreso solo a partire dai primi anni '80 del secolo scorso. L'effetto dell'accoppiamento spin-orbita nei nuclei è grande, dell'ordine del MeV rispetto ad energie di singola particella di qualche decina di MeV, ed era difficile da descrivere utilizzando i modelli nucleari relativistici sviluppati fino a quel momento.

Per quanto ci riguarda, l'idea è quella di descrivere gli effetti di spin-orbita nell'ambito della tradizionale trattazione della 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,

$$V(r) = V_c(r) - \frac{2\alpha}{\hbar^2} \mathbf{l} \cdot \boldsymbol{\sigma} , \quad (2.30)$$

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 (2.12), dove le armoniche sferiche, autostati dell'operatore \mathbf{l}^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 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

$$\mathbf{j}^2 = (\mathbf{l} + \mathbf{s})^2 = \mathbf{l}^2 + \mathbf{s}^2 + 2\mathbf{l} \cdot \mathbf{s} , \quad (2.31)$$

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

$$\mathbf{l} \cdot \mathbf{s} = \frac{1}{2} (\mathbf{j}^2 - \mathbf{l}^2 - \mathbf{s}^2) . \quad (2.32)$$

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

$$\phi_{nljm}(\mathbf{r}) = R_{nj}(r) \sum_{\mu\sigma} \langle l \mu \frac{1}{2} \sigma | j m \rangle Y_{l\mu}(\Omega) \chi_\sigma = R_{nj}(r) \mathcal{Y}_{ljm}(\Omega) , \quad (2.33)$$

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

$$\mathbf{j}^2 \mathcal{Y}_{ljm}(\Omega) = j(j+1) \hbar^2 \mathcal{Y}_{ljm}(\Omega) \quad ; \quad \mathbf{j}_z \mathcal{Y}_{ljm}(\Omega) = m \hbar \mathcal{Y}_{ljm}(\Omega) , \quad (2.34)$$

$$\mathbf{l}^2 \mathcal{Y}_{ljm}(\Omega) = l(l+1) \hbar^2 \mathcal{Y}_{ljm}(\Omega) \quad ; \quad \mathbf{s}^2 \mathcal{Y}_{ljm}(\Omega) = \frac{3}{4} \hbar^2 \mathcal{Y}_{ljm}(\Omega) , \quad (2.35)$$

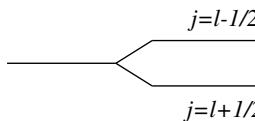
e quindi, per quanto riguarda il termine inserito nell'hamiltoniana abbiamo che

$$\mathbf{l} \cdot \mathbf{s} \mathcal{Y}_{ljm}(\Omega) = \frac{1}{2} [\mathbf{j}^2 - \mathbf{l}^2 - \mathbf{s}^2] \mathcal{Y}_{ljm}(\Omega) = \frac{1}{2} \left[j(j+1) - l(l+1) - \frac{3}{4} \right] \hbar^2 \mathcal{Y}_{ljm}(\Omega) . \quad (2.36)$$

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

$$\begin{aligned} \text{per } j = l + \frac{1}{2} \quad & \left[\left(l + \frac{1}{2} \right) \left(l + \frac{3}{2} \right) - l^2 - l - \frac{3}{4} \right] = l \\ \text{per } j = l - \frac{1}{2} \quad & \left[\left(l - \frac{1}{2} \right) \left(l + \frac{1}{2} \right) - l^2 - l - \frac{3}{4} \right] = -(l+1) , \end{aligned} \quad (2.37)$$

quindi ϵ_{nl}^c , l'energia ottenuta con il solo termine V_c nella (2.30), viene modificata come segue



$$\begin{aligned} \epsilon_{nlj} &= \epsilon_{nl}^c + \alpha(l+1) \quad \text{per } j = l - \frac{1}{2} \\ \epsilon_{nlj} &= \epsilon_{nl}^c - \alpha l \quad \text{per } j = l + \frac{1}{2} \end{aligned} \quad (2.38)$$

Figura 2.3: Separazione del livello di singola particella per l'azione del termine di spin-orbita.

La definizione delle costanti della (2.30) 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.

2.3 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 medio U 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 $U = 0$. In questo caso l'equazione di Schrödinger di singola particella è

$$-\frac{\hbar^2}{2m_i}\nabla_i^2\phi_i(\mathbf{r}) = \epsilon_i\phi_i(\mathbf{r}) , \quad (2.39)$$

con

$$\phi_i(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{\mathcal{V}}} e^{i(\mathbf{k}_i \cdot \mathbf{r})} \chi_\sigma \chi_\tau , \quad (2.40)$$

dove \mathcal{V} è il volume, e χ sono spinori di Pauli relativi allo spin ed, eventualmente, 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, quindi, 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

$$\phi_i(x+L, y, z) = \phi_i(x, y+L, z) = \phi_i(x, y, z+L) = \phi_i(x, y, z) . \quad (2.41)$$

Dato che

$$\phi_i(\mathbf{r}=0) = \frac{1}{\sqrt{\mathcal{V}}} \chi_\sigma \chi_\tau , \quad (2.42)$$

per rispettare le condizioni periodiche dobbiamo imporre

$$e^{ik_x L} = e^{ik_y L} = e^{ik_z L} = 1 , \quad (2.43)$$

che implica

$$k_x = \frac{2\pi}{L} n_x ; k_y = \frac{2\pi}{L} n_y ; k_z = \frac{2\pi}{L} n_z , \quad (2.44)$$

dove n_x, n_y, n_z sono numeri interi. Definendo $\mathbf{n} \equiv (n_x, n_y, n_z)$ posso scrivere

$$d^3 \mathbf{n} = \frac{L^3}{(2\pi)^3} d^3 \mathbf{k} = \frac{L^3}{(2\pi\hbar)^3} d^3 \mathbf{p} . \quad (2.45)$$

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

$$d\epsilon = d\left(\frac{1}{2}m\mathbf{v}^2\right) = \frac{1}{2}m 2v dv = v m dv = v dp , \quad (2.46)$$

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

$$\rho_\epsilon = \frac{d^3 \mathbf{n}}{d\epsilon} = \frac{L^3}{(2\pi\hbar)^3} d^3 \mathbf{p} \frac{1}{v dp} = \frac{\mathcal{V}}{(2\pi\hbar)^3} p^2 d\Omega_p dp \frac{1}{v dp} = \frac{\mathcal{V}}{(2\pi\hbar)^3} \frac{p^2}{v} d\Omega_p , \quad (2.47)$$

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 1 delle funzioni d'onda di singola particella implica che ogni prodotto scalare sia moltiplicato per il fattore $\mathcal{V}/(2\pi)^3$. Infatti

$$\langle \phi_a | \phi_b \rangle = \frac{\mathcal{V}}{(2\pi)^3} \int d^3 r \frac{1}{\sqrt{\mathcal{V}}} e^{-i(\mathbf{k}_a \cdot \mathbf{r})} \frac{1}{\sqrt{\mathcal{V}}} e^{i(\mathbf{k}_b \cdot \mathbf{r})} = \frac{\mathcal{V}}{(2\pi)^3} \frac{(2\pi)^3 \delta(\mathbf{k}_a - \mathbf{k}_b)}{\mathcal{V}} . \quad (2.48)$$

Calcoliamo la densità definita come

$$\rho(r) = \sum_a^A |\phi_a(\mathbf{r})|^2 , \quad (2.49)$$

dove A è il numero di fermioni che compongono il sistema. Ogni stato di singola particella caratterizzato da energia e terze componenti di spin e isospin, è occupato esclusivamente da un solo fermione. A temperatura zero, quando il sistema ha la minima energia possibile, sono completamente occupati tutti gli stati con un'energia inferiore ad una certa 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

$$\epsilon_F = \frac{\hbar^2}{2m} \mathbf{k}_F^2 . \quad (2.50)$$

Il calcolo della densità è quindi

$$\rho(r) = \sum_{a \leq k_F} |\phi_a(\mathbf{r})|^2 = \frac{\mathcal{V}}{(2\pi)^3} \mathcal{D} \int_0^{k_F} d^3 k \frac{1}{\sqrt{\mathcal{V}}} e^{-i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r})} \frac{1}{\sqrt{\mathcal{V}}} e^{i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r})} = \frac{\mathcal{D}}{(2\pi)^3} \int_0^{k_F} d^3 k . \quad (2.51)$$

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

$$\mathcal{D} = \sum_{\sigma=\pm 1/2} \chi_\sigma^\dagger \chi_\sigma = 2 , \quad (2.52)$$

e per nucleoni

$$\mathcal{D} = \sum_{\sigma=\pm 1/2} \chi_\sigma^\dagger \chi_\sigma \sum_{\tau=\pm 1/2} \chi_\tau^\dagger \chi_\tau = 4 , \quad (2.53)$$

Quindi calcolando l'integrale della (2.51) otteniamo

$$\rho(r) = \frac{\mathcal{D}}{(2\pi)^3} \int_0^{k_F} d^3 k = \frac{\mathcal{D}}{(2\pi)^3} \int_0^{k_F} k^2 dk \int d\Omega_k = \frac{\mathcal{D}}{(2\pi)^3} \frac{4}{3} \pi k_F^3 = \frac{\mathcal{D}}{2\pi^2} \frac{k_F^3}{3} . \quad (2.54)$$

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 (2.39) 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.

$$\langle \phi_a | \frac{-\hbar^2}{2m} \nabla^2 | \phi_a \rangle = \frac{\mathcal{V}}{(2\pi)^3} \int d^3 r \frac{1}{\sqrt{\mathcal{V}}} e^{-i(\mathbf{k}_a \cdot \mathbf{r})} \left(\frac{-\hbar^2}{2m} \nabla^2 \right) \frac{1}{\sqrt{\mathcal{V}}} e^{i(\mathbf{k}_a \cdot \mathbf{r})} = \frac{\hbar^2 k_a^2}{2m} , \quad (2.55)$$

che conferma la relazione $\epsilon_a = p_a^2/2m$.

L'energia cinetica del sistema è quindi

$$\begin{aligned} \mathcal{K} &= \sum_{k \leq k_F} \langle \phi_a | \frac{-\hbar^2}{2m} \nabla^2 | \phi_a \rangle = \mathcal{D} \frac{\mathcal{V}}{(2\pi)^3} \int_0^{k_F} d^3 k \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \mathcal{D} \frac{\mathcal{V}}{(2\pi)^3} \frac{\hbar^2 4\pi}{2m} \int_0^{k_F} k^2 k^2 dk \\ &= \mathcal{D} \frac{\mathcal{V}}{(2\pi)^3} \frac{\hbar^2 4\pi}{2m} \frac{k_F^5}{5} = \mathcal{D} \frac{\mathcal{V}}{(2\pi)^3} \frac{\hbar^2 4\pi}{2m} \frac{k_F^2}{5} \left(\frac{2\pi^2 3\rho}{\mathcal{D}} \right) = \frac{3}{5} \mathcal{V} \rho \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m} = \frac{3}{5} A \epsilon_F . \end{aligned} \quad (2.56)$$

Quindi l'energia cinetica per particella è

$$\frac{\mathcal{K}}{A} = \frac{3}{5} \epsilon_F \quad (2.57)$$

	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	0.92	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 2.3: Le densità elettroniche sono dati empirici dai quali si ricavano i valori di k_F , Eq. (2.54), ϵ_F , Eq. (2.50), e B , Eq. (2.60). I dati empirici sono stati estratti dalle Ref. [Ash76, Kit86].

Possiamo calcolare la pressione del sistema utilizzando l'espressione

$$E = \mathcal{K} = \frac{3}{5} A \epsilon_F = \frac{3}{5} A \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m} = \frac{3}{5} A \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{2\pi^2 3 A}{\mathcal{D}} \right)^{2/3} = \mathcal{S} \mathcal{V}^{-2/3} , \quad (2.58)$$

dove ho chiamato \mathcal{S} la parte che moltiplica \mathcal{V} . La pressione è quindi

$$P = - \left(\frac{\partial E}{\partial \mathcal{V}} \right)_A = -\mathcal{S} \left(-\frac{2}{3} \right) \mathcal{V}^{-2/3} \mathcal{V}^{-1} = \frac{2}{3} \frac{E}{\mathcal{V}} = \frac{2}{3} \frac{1}{\mathcal{V}} \frac{3}{5} A \epsilon_F = \frac{2}{5} \epsilon_F \rho \quad (2.59)$$

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

$$B = \frac{1}{K} = -\mathcal{V} \frac{\partial P}{\partial \mathcal{V}} = -\mathcal{V} \frac{2}{3} \mathcal{S} \mathcal{V}^{-5/3} \left(-\frac{5}{3} \right) \mathcal{V}^{-1} = \frac{10}{9} \frac{E}{\mathcal{V}} = \frac{2}{3} \epsilon_F \rho \quad (2.60)$$

Nella tabella 2.3 mostro i valori di k_F , ϵ_F e B calcolati per gas di elettroni di diversi cristalli. Questi valori sono ottenuti usando, rispettivamente, le equazioni (2.54) (2.50) e (2.60) 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.

In modelli a campo medio per sistemi ad invarianza traslazionale, il solo ingrediente fisico nuovo rispetto ad una trattazione classica è il principio di esclusione di Pauli. Il calore specifico dei metalli è un caso in cui l'esistenza di questo vincolo per i fermioni ha conseguenze macroscopiche.

La teoria classica di un gas di A particelle non interagenti, e prive di struttura interna, prevede un valore del calore specifico di $\frac{3}{2}Ak_B$, dove k_B è la costante di Boltzmann. I valori osservati del contributo elettronico a temperature ambiente sono inferiori ad un centesimo di quel valore. La spiegazione di questa osservazione è legata al principio di esclusione di Pauli. Nel caso classico, tutti gli elettroni contribuiscono al calore specifico del sistema, anche a basse temperature, ovvero quando le energie di eccitazione del sistema sono molto piccole rispetto all'energia totale del sistema nel suo stato fondamentale. Nel caso quantistico, per basse temperature, solo quegli elettroni vicino alla superficie di Fermi possono cambiare stato lasciando un vuoto, buco, sotto l'energia di Fermi per occupare uno dei livelli vuoti al di sopra tale energia. Per piccole energie di eccitazione, gli elettroni con energie molto inferiori all'energia di Fermi non possono cambiare il proprio stato perché andrebbero ad occupare stati energetici già occupati da altri elettroni.

Derivo qui sotto l'espressione del calore specifico di un gas di elettroni liberi. Usando l'espressione (2.54) della densità, in numero, delle particelle ottengo

$$k_F^3 = \frac{2\pi^2}{\mathcal{D}} 3\rho, \quad (2.61)$$

$$\epsilon_F = \frac{\hbar^2}{2m} k_F^2 = \left(\frac{2\pi^2}{\mathcal{D}} 3\rho \right)^{2/3}, \quad (2.62)$$

$$A = \mathcal{V}\rho = \frac{\mathcal{V}\mathcal{D}}{2\pi^2 3} \left(\frac{2m}{\hbar^2} \epsilon_F \right)^{3/2}, \quad (2.63)$$

e quindi per la densità degli stati ottengo l'espressione

$$\rho_\epsilon(\epsilon_F) \equiv \frac{dA}{d\epsilon} = \frac{\mathcal{V}\mathcal{D}}{4\pi^2} \left(\frac{2m}{\hbar^2} \right)^{3/2} \epsilon_F^{1/2} \quad (2.64)$$

L'aumento dell'energia interna E di un gas di elettroni quando il valore della temperatura passa da 0 a T è dato da

$$\Delta E \equiv E(T) - E(0) = \int_0^\infty d\epsilon \epsilon \rho_\epsilon(\epsilon) f(\epsilon, T) - \int_0^\infty d\epsilon \epsilon \rho_\epsilon(\epsilon) f(\epsilon, 0). \quad (2.65)$$

Nei testi di termodinamica l'energia del sistema E viene indicata con il simbolo U . Nell'equazione precedente $f(\epsilon, T)$ è la distribuzione di Fermi-Dirac

$$f(\epsilon, T) \equiv \frac{1}{\exp[(\epsilon - \mu)/k_B T] + 1}, \quad (2.66)$$

dove ho indicato con μ il potenziale chimico

$$\mu = \frac{\partial E}{\partial A}, \quad (2.67)$$

che è uguale a ϵ_F per $T = 0$. La distribuzione di Fermi-Dirac, nel limite $T = 0$ si trasforma in $\Theta(\epsilon_F - \epsilon)$, dove $\Theta(x)$ è la funzione gradino uguale a 1 per $x > 0$ e a 0 per $x < 0$. L'equazione (2.65) diventa

$$\Delta E \equiv E(T) - E(0) = \int_0^\infty d\epsilon \epsilon \rho_\epsilon(\epsilon) f(\epsilon, T) - \int_0^{\epsilon_F} d\epsilon \epsilon \rho_\epsilon(\epsilon). \quad (2.68)$$

Usando questo formalismo, il numero di particelle può essere espresso come

$$A = \int_0^\infty d\epsilon \frac{dA}{d\epsilon} = \int_0^\infty d\epsilon \rho_\epsilon(\epsilon) f(\epsilon, T). \quad (2.69)$$

Moltiplico questa espressione per ϵ_F

$$\epsilon_F A = \left(\int_0^{\epsilon_F} + \int_{\epsilon_F}^{\infty} \right) d\epsilon \epsilon_F \rho_\epsilon(\epsilon) f(\epsilon, T) = \int_0^{\epsilon_F} d\epsilon \epsilon_F \rho_\epsilon(\epsilon) . \quad (2.70)$$

dove l'ultima uguaglianza indica che il numero di particelle non cambia quando la temperatura passa dal valore 0 a T.

Aggiungendo e sottraendo all'espressione (2.68) di ΔE il termine $\epsilon_F A$ ottengo

$$\begin{aligned} \Delta E &= \int_0^{\infty} d\epsilon \epsilon \rho_\epsilon(\epsilon) f(\epsilon, T) - \left(\int_0^{\epsilon_F} + \int_{\epsilon_F}^{\infty} \right) d\epsilon \epsilon_F \rho_\epsilon(\epsilon) f(\epsilon, T) \\ &\quad - \int_0^{\epsilon_F} d\epsilon \epsilon \rho_\epsilon(\epsilon) + \int_0^{\epsilon_F} d\epsilon \epsilon_F \rho_\epsilon(\epsilon) \\ &= \int_{\epsilon_F}^{\infty} d\epsilon (\epsilon - \epsilon_F) \rho_\epsilon(\epsilon) f(\epsilon, T) + \int_0^{\epsilon_F} d\epsilon (\epsilon_F - \epsilon) \rho_\epsilon(\epsilon) [1 - f(\epsilon, T)] . \end{aligned} \quad (2.71)$$

Il termine $\rho_\epsilon(\epsilon) f(\epsilon, T) d\epsilon$ rappresenta il numero di elettroni che passano da livelli di energia ϵ a livelli di energia $\epsilon + d\epsilon$. Nel secondo integrale il termine $1 - f(\epsilon, T)$ è la probabilità che un elettrone sia rimosso da un livello con energia ϵ .

Il calore specifico per un gas di elettroni è dato da

$$C_{el} \equiv \frac{dE}{dT} = \int_0^{\infty} d\epsilon (\epsilon - \epsilon_F) \rho_\epsilon(\epsilon) \frac{df(\epsilon, T)}{dT} , \quad (2.72)$$

dove ho ipotizzato che solo f dipenda da T . Per temperature molto inferiori alla temperatura di Fermi, cioè $k_B T \ll \epsilon_F$, si può considerare la densità degli stati quasi costante, quindi

$$C_{el} \simeq \rho_\epsilon(\epsilon_F) \int_0^{\infty} d\epsilon (\epsilon - \epsilon_F) \frac{df(\epsilon, T)}{dT} . \quad (2.73)$$

Questa approssimazione è ben verificata se consideriamo che i valori delle temperature di Fermi sono $\sim 5 \times 10^4 \text{K}$.

Il calcolo nel riquadro indica che

$$C_{el} \simeq k_B^2 T \rho_\epsilon(\epsilon_F) \frac{\pi^2}{3} \quad (2.74)$$

In seguito userò $\tau = k_B T$ e $x = (\epsilon - \mu)/(k_B T)$.

$$\frac{1}{k_B} \frac{df(\epsilon, T)}{dT} = \frac{df}{d\tau} = \frac{\exp(\frac{\epsilon - \mu}{k_B T}) \frac{\epsilon - \mu}{(k_B T)^2}}{[\exp(\frac{\epsilon - \mu}{k_B T}) + 1]^2} = \frac{1}{[e^x + 1]^2} e^x \frac{x}{\tau} . \quad (2.75)$$

Per la definizione di x si ha che $dx = d\epsilon/\tau$, quindi

$$\begin{aligned} C_{el} &= k_B \rho_\epsilon(\epsilon_F) \int_{-\epsilon_F/\tau}^{\infty} (dx \tau) (\tau x) \frac{1}{[e^x + 1]^2} e^x \frac{x}{\tau} \\ &\simeq k_B \tau \rho_\epsilon(\epsilon_F) \int_{-\infty}^{\infty} dx x^2 \frac{e^x}{[e^x + 1]^2} = k_B \tau \rho_\epsilon(\epsilon_F) \frac{\pi^2}{3} . \end{aligned} \quad (2.76)$$

Nell'ultima equazione ho esteso il limite inferiore a $-\infty$ perchè il termine e^x è già molto piccolo per $x = -\epsilon_F/\tau$ quando consideriamo temperature ambiente. Rimane da effettuare un integrale noto in letteratura.

Dall'equazione (2.64) ricavo che

$$\rho_\epsilon(\epsilon_F) = \frac{1}{2} \frac{\mathcal{V}\mathcal{D}}{2\pi^2} \left(\frac{2m}{\hbar^2} \right)^{3/2} \epsilon_F^{1/2} = \frac{1}{2} 3 \frac{1}{3} \frac{\mathcal{V}\mathcal{D}}{2\pi^2} \left(\frac{2m}{\hbar^2} \epsilon_F \right)^{3/2} \frac{1}{\epsilon_F} = \frac{3}{2} \frac{A}{\epsilon_F}, \quad (2.77)$$

dove ho usato l'espressione (2.63) per il numero di elettroni. Considerando che $\epsilon_F = k_B T_F$, l'espressione del calore specifico diventa

$$C_{el} = \frac{\pi^2}{3} \frac{3}{2} \frac{A}{k_B T_F} k_B^2 T = \frac{\pi^2}{2} A k_B \frac{T}{T_F}. \quad (2.78)$$

Questo risultato indica come, contrariamente alle previsioni della statistica classica, solo una frazione di elettroni proporzionale a T/T_F viene eccitata teoricamente alla temperatura T . Questi sono gli elettroni che si trovano vicino alla superficie di Fermi.

Elemento	Teoria	Esperimento
Cu	5.3	5.8
Ag	1.2	1.6
Au	1.5	1.6
Fe	1.5	12.0
Mn	1.5	40.0
Bi	4.3	0.2

Tabella 2.4: Valori per il coefficiente lineare γ dei calori specifici di alcuni metalli Eq. (2.79). I valori sono espressi in unità di 10^{-4} cal mole $^{-1}$ K $^{-2}$. I dati empirici sono stati estratti dalla Ref. [Ash76].

La previsione del comportamento lineare del calore specifico nei metalli è una delle più importanti conseguenze della statistica di Fermi-Dirac, o, in altre parole, dell'efficacia del principio di esclusione di Pauli per gli elettroni. I risultati del calcolo presentato sopra sono validi fino a che il contributo al calore specifico del metallo è dovuto ai soli elettroni di conduzione. In realtà la situazione è tale che, ad alte temperature, il valore del calore specifico è dominato dal contributo degli ioni che formano il metallo. Tuttavia al di sotto delle temperature ambiente questo contributo ha un comportamento proporzionale a T^3 , e per basse temperature diventa inferiore a quello degli elettroni che, come indica l'equazione (2.78) è lineare in T .

Per separare i due contributi si considera il calore specifico molare come

$$c_v = \gamma T + K T^3. \quad (2.79)$$

Il valore sperimentale del coefficiente γ viene ottenuto facendo una estrapolazione dei valori sperimentali per T tendente a zero.

Nella tabella 2.4 confronto alcuni valori del coefficiente γ , calcolati con l'equazione (2.78), con i valori empirici. I metalli alcalini (Cu, Ag, Au) sono abbastanza ben descritti dal modello di gas di Fermi. Questo modello sbaglia completamente le previsioni per Fe e Mn indicando valori molto più piccoli di quelli misurati. Al contrario la previsione per il Bi è notevolmente maggiore del valore misurato.

Capitolo 3

Interazioni

3.1 Introduzione

Nei modelli di campo medio l'interazione tra le particelle che compongono il sistema a molti corpi non viene considerata. In altre parole, in questi modelli il termine di interazione nell'equazione (2.1) è posto uguale a zero. Nel capitolo precedente ho mostrato come facendo questa approssimazione, l'hamiltoniana totale del sistema risulti essere somma di hamiltoniane di singola particella. Le teorie a molti corpi superano i modelli di campo medio e considerano anche l'interazione tra le particelle.

L'ambito nel quale affrontiamo la descrizione di questi sistemi a molti corpi è quello non relativistico. La validità di questa descrizione è limitata a situazioni in cui i valori delle energie dei fenomeni studiati siano molto più piccoli di quelli delle masse a riposo delle particelle che formano il sistema. Nell'ambito non relativistico l'interazione tra le particelle è ben descritta in termini di potenziale. Il concetto di potenziale implica l'ipotesi che l'interazione si trasmetta istantaneamente tra particelle, indipendentemente dalla loro distanza. Questa affermazione è ovviamente falsificata dall'esistenza della velocità limite, quella della luce nel vuoto, oltre la quale non è possibile trasferire segnali. Rimane comunque il fatto che, nelle condizioni energetiche indicate sopra, gli effetti relativistici sono trascurabili, o sono trattabili come piccole perturbazioni.

In questo capitolo considererò tre diverse tipologie di sistemi a molti corpi, gas di elettroni, nuclei atomici e, infine, fluidi quantistici, ovvero liquidi e gas fortemente interagenti, costituiti da molecole. In questi sistemi l'energia di interazione tra le particelle è confrontabile con la loro energia cinetica. Per ognuno di questi sistemi indicherò il potenziale di interazione tra le particelle che lo compongono e come questo potenziale venga definito. La definizione dell'hamiltoniana, cioè dell'interazione, insieme alla base di campo medio, completa le informazioni necessarie per poter affrontare il problema della descrizione del sistema a molti corpi.

3.2 Gas di elettroni

Una buona descrizione dei metalli è data dal modello nel quale gli elettroni di valenza degli atomi che costituiscono il metallo diventano elettroni di conduzione e si muovono quasi liberamente attraverso il volume del metallo. Il modello di elettroni liberi è quello del gas di Fermi descritto nel paragrafo 2.3.

Per descrivere un vero metallo bisogna considerare sia l'interazione reciproca tra gli elettroni sia quella tra gli elettroni e gli atomi che compongono il reticolo cristallino. La situazione è estremamente complicata, ma, se si considerano temperature molto vicine allo zero assoluto, il modello chiamato Jellium, o gas uniforme di elettroni, descrive abbastanza bene alcune proprietà del sistema. In questo modello, le cariche positive che legano gli elettroni e che rendono elettricamente neutro il sistema globale, formano

uno sfondo uniformemente distribuito nello spazio. Questo modello permette di evidenziare quegli effetti che nei solidi sono generati dalla natura quantistica degli elettroni, il principio di esclusione di Pauli, e dalla loro mutua interazione, indipendentemente dai dettagli della struttura cristallina.

In questo modello l'hamiltoniana del sistema è data da

$$H = \sum_{i=1}^A -\frac{\hbar^2}{2m_i} \nabla_i^2 + \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^A \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|} \quad (3.1)$$

dove e è la carica elementare, ed ϵ_0 la permeabilità nel vuoto.

3.3 Nuclei

La descrizione dei sistemi nucleari è basata sulla interazione tra nucleoni. I nucleoni non sono elementi fondamentali della natura, come invece lo sono gli elettroni, ma sono sistemi composti, formati da quark, antiquark e gluoni. La teoria che oggi è deputata a descrivere l'interazione nucleare forte, quella a cui sono sensibili quark e gluoni, ma che non coinvolge i leptoni, è la Cromodinamica Quantistica (QCD). Questa teoria è non perturbativa nel regime energetico di interesse della fisica di nuclei, ovvero da qualche centinaia di keV a poche centinaia di MeV. Per questo motivo non è possibile adottare le ben consolidate tecniche di calcolo utilizzate per risolvere le equazioni dell'Elettrodinamica Quantistica (QED), che è invece perturbativa.

Le equazioni di campo di QCD vengono risolte in maniera prevalentemente numerica suddividendo lo spazio-tempo in un insieme di punti discreti, con l'ambizione di rendere questo reticolo sempre più fitto in modo da descrivere il continuo spazio-temporale. Questo, dal punto di vista numerico, equivale ad ottenere soluzioni indipendenti dalla densità della griglia. Nonostante l'enorme sviluppo delle tecnologie dei computer, siamo ancora lontani dal raggiungere risultati in questo limite di convergenza. Di fatto la QCD è inutilizzabile per descrivere mesoni, barioni e la loro interazione. A maggior ragione non si utilizzano quark e gluoni per descrivere i nuclei.

Per i motivi esposti, le particelle fondamentali, i gradi di libertà, utilizzati per la descrizione dei nuclei, e più in generale dei sistemi nucleari, sono quindi barioni e mesoni, soprattutto protoni e neutroni, comunemente chiamati nucleoni. Ovviamente la QCD rimane sullo sfondo, come limite asintotico, ma, di fatto, non viene utilizzata per descrivere l'interazione tra due nucleoni.

L'interazione nucleone-nucleone viene modellizzata per descrivere i dati sperimentali dei sistemi di due nucleoni, ovvero il solo stato legato esistente, il deutone, e diverse migliaia di dati di diffusione elastica tra due nucleoni.

Le caratteristiche del deutone sono le seguenti.

1. È il solo sistema legato di due nucleoni.
2. È formato da un protone e un neutrone.
3. Ha un'energia di legame di 2.22 MeV circa.
4. Non ha stati eccitati.
5. Ha spin totale $S = 1$.
6. Ha un momento di dipolo magnetico in magnetoni nucleari

$$\mu_D = 0.8574 = \mu_p + \mu_n - 0.0222 \ ,$$

dove μ_p e μ_n sono i momenti di dipolo magnetico del protone e del neutrone, rispettivamente.

7. Ha un momento di quadrupolo elettrico $Q=2.82$ mb.

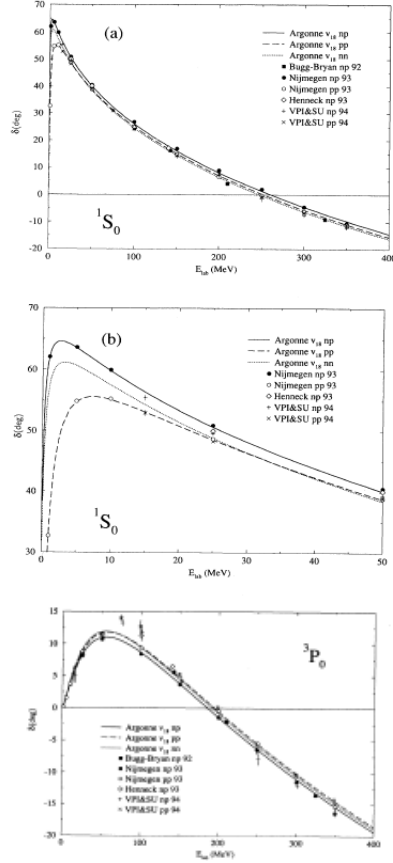


Figura 3.1: Sfasamenti per onde parziali S , P e D , momenti angolari relativi $L = 0, 1, 2$, rispettivamente, per processi di diffusione protone-neutrone.

nella figura 3.1. La simbologia normalmente usata per identificare gli sfasamenti indica nella lettera al centro l'onda parziale identificata con la solita nomenclatura spettroscopica S , P , D per $L = 0, 1, 2$. L'indice superiore indica con 1 il singoletto di spin, $S = 0$, e con 3, il tripletto, $S = 1$. L'indice inferiore indica il momento angolare totale $\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S}$. Oggi vengono definiti *realistici* quei potenziali nucleone-nucleone che riescono a descrivere questi dati sperimentali con un χ^2 per dato dell'ordine di 1.

Le proprietà generati del potenziale tra due nucleoni che emergono dall'analisi dei dati relativi al deutone e a quelli dei processi di diffusione sono le seguenti.

- *Attrazione.* - L'esistenza dei nuclei indica che l'interazione tra due nucleoni ha certamente una parte attrattiva.
- *Corto Raggio.* - Ci sono varie osservazioni che indicano che l'interazione tra due nucleoni sia attiva sino a distanze dell'ordine di 2 fm. A distanze maggiori è nulla. Questa è una differenza essenziale dell'interazione nucleone-nucleone rispetto alla interazione elettromagnetica e a quella gravitazionale che hanno raggi di interazione infiniti.

I limiti più stringenti per quanto riguarda la definizione dell'interazione tra due nucleoni vengono dai dati di diffusione elastica tra due nucleoni. Dato che si trascura la struttura interna dei nucleoni, è necessario avere informazioni da processi di collisione che possano essere descritti trascurando i gradi di libertà interni al nucleone. Per questo motivo si considerano solo processi di diffusione elastica nei quali non c'è trasferimento di energia per l'eccitazione dei gradi di libertà interna del nucleone. Fino alla soglia di produzione di pioni, 145 MeV, i processi sono esclusivamente elastici.

I dati sperimentali sono stati raccolti in vari esperimenti effettuati in diversi laboratori. Rendere coerente ed omogeneo l'insieme di questi dati non è stato banale. I più aggiornati insiemi di dati sono composti da circa 3000 dati di diffusione protone-protone e circa 4700 dati di diffusione neutrone-protone.

Le sezioni d'urto elastiche vengono decomposte in onde parziali, dipendenti dal valore del momento angolare relativo della coppia interagente. Da queste sezioni d'urto decomposte in onde parziali è possibile estrarre lo sfasamento. La relazione tra sezione d'urto totale σ e gli sfasamenti è data da

$$\sigma = \frac{4\pi}{k^2} \sum_{L=0}^{\infty} (2L+1) \sin^2 \delta_L ,$$

dove L è il momento angolare relativo dei due nucleoni che collidono, e δ_L il relativo sfasamento. I dati sperimentali sono normalmente presentati in termini di sfasamenti come mostrato

- *Dipendenza dallo spin e dall'isospin.* - L'unico stato legato di un sistema di due nucleoni è il deutone formato da un protone ed un neutrone e con spin totale 1. Il secondo fatto indica una dipendenza dall'orientamento degli spin dei nucleoni interagenti. In caso contrario esisterebbero anche deutoni con spin nullo con abbondanza di 1/3 rispetto a quelli con spin 1. Se l'interazione non dipendesse dall'isospin dovrebbero esistere stati legati di due neutroni, ed eventualmente anche di due protoni, anche se in questo caso l'interazione di repulsione elettromagnetica potrebbe essere sufficiente per impedire la formazione del sistema legato.
- *Non centrale.* - Il deutone presenta un momento di quadrupolo elettrico diverso da zero. Questo è possibile solo se la distribuzione di carica non è sferica. Per potenziali centrali lo stato fondamentale del sistema di due particelle è descritto dal moto relativo in onda s , ovvero da una funzione d'onda con momento angolare nullo, quindi con simmetria sferica. Per avere una deformazione in questo sistema è necessario inserire nell'interazione un termine che, a parità di distanza tra i due nucleoni, si comporti in modo differente se gli spin sono paralleli od ortogonali alla direzione della retta che congiunge i due nucleoni. Il termine in questione ha una dipendenza del tipo $(\boldsymbol{\sigma}_1 \cdot \mathbf{r})(\boldsymbol{\sigma}_2 \cdot \mathbf{r})$, dove $\boldsymbol{\sigma}$ indica lo spin del nucleone e \mathbf{r} il vettore posizione che unisce i due nucleoni, e viene chiamato tensoriale.
- *Core repulsivo.* - Dall'analisi degli sfasamenti legati alla diffusione elastica tra due nucleoni, risulta un cambio di segno con l'aumentare dell'energia della collisione nel centro di massa del sistema. Questo significa che, aumentando il potere risolutivo della sonda, l'interazione da attrattiva diventa repulsiva.

I modelli di interazione utilizzati possono essere catalogati in tre diverse tipologie: potenziali fenomenologici, a scambio mesonico, e quelli basati su teorie di campo effettive.

3.3.1 Potenziali fenomenologici

Questi potenziali sono costruiti allo scopo di descrivere l'interazione nucleone-nucleone per poterla utilizzare in calcoli di struttura nucleare. Non c'è alcuna ambizione di legare i termini dell'interazione a fenomeni fisici che possano spiegarne le caratteristiche. Si tratta di puro *fit* di dati sperimentali. L'unica guida teorica per la costruzione di questi potenziali è quella delle simmetrie che l'interazione deve rispettare. Queste sono riassunte qui sotto.

1. *Hermitianità.*
Globalmente l'hamiltoniana è hermitiana, e dato che il termine di energia cinetica è hermitiano lo deve essere anche il termine di energia potenziale.
2. *Invarianza per scambio delle coordinate* $\Rightarrow V(1, 2) = V(2, 1)$.
L'interazione avviene tra particelle identiche.
3. *Invarianza traslazionale* $\Rightarrow V(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = V(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) \equiv V(\mathbf{r}_{12})$.
L'interazione dipende solo dalla distanza relativa \mathbf{r}_{12} tra le due particelle.
4. *Invarianza galileiana*
L'interazione dipende solo dall'impulso relativo, non dipende dal movimento dell'osservatore rispetto al sistema osservato.
5. *Invarianza per inversioni spaziali* $\Rightarrow V(\mathbf{r}, \mathbf{p}) = V(-\mathbf{r}, -\mathbf{p})$.
L'interazione nucleare forte conserva la parità, contrariamente a quelle deboli che la violano.
6. *Invarianza per inversioni temporali* $\Rightarrow V(\mathbf{p}, \mathbf{S}) = V(-\mathbf{p}, -\mathbf{S})$,
dove $\mathbf{S} = \boldsymbol{\sigma}_1 + \boldsymbol{\sigma}_2$ è lo spin totale della coppia.

7. Invarianza per rotazioni spaziali

Il momento angolare del sistema è conservato in presenza di interazione tra le particelle.

8. Invarianza per rotazioni di isospin

Questa proprietà indica che l'interazione nucleone - nucleone è la stessa per protone - protone, neutrone - neutrone e protone - neutrone, ogni volta che le sezioni d'urto sono confrontabili. Quest'ultima precisazione è legata al fatto che i nucleoni, essendo fermioni, sono soggetti al principio di esclusione di Pauli, che viene espresso imponendo che la funzione d'onda che descrive un sistema composto da più particelle identiche debba essere antisimmetrica per lo scambio di due di esse. Dato che protone e neutrone sono particelle differenti, o, nel formalismo di isospin, hanno valori diversi della terza componente dell'isospin, nelle collisioni possono accedere a tutti gli stati finali poiché non soggetti al principio di esclusione di Pauli. Questo non è possibile per nucleoni dello stesso tipo, per i quali solo specifiche combinazioni di onde parziali e accoppiamenti degli spin sono permesse. In realtà i moderni esperimenti indicano una piccola violazione di questa invarianza. Nelle versioni più aggiornate dei potenziali fenomenologici sono inseriti dei termini che violano questa invarianza.

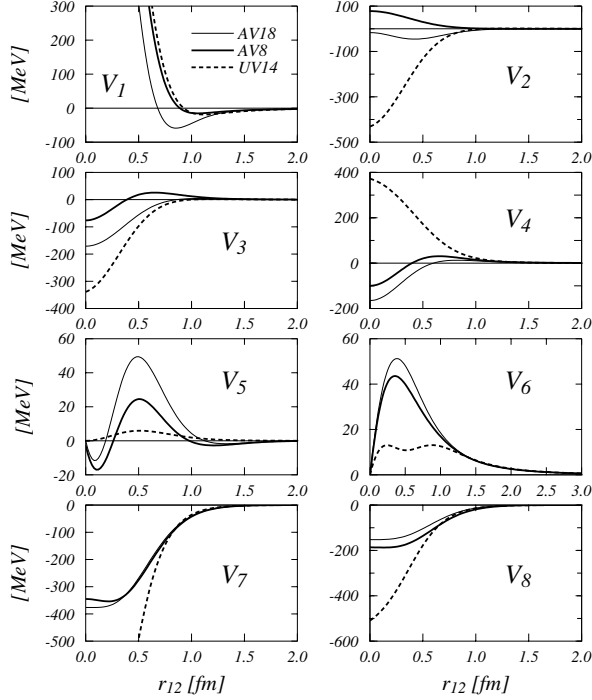


Figura 3.2: I primi 8 termini definiti in (3.2) per i potenziali Urbana V14 (UV14), Argonne V8 (AV8), e Argonne V18 (AV18).

potenziale vengono considerati anche termini con accoppiamento di spin-orbita

$$O^{p=7,8} = \mathbf{L} \cdot \mathbf{S}, \mathbf{L} \cdot \mathbf{S} \boldsymbol{\tau}_i \cdot \boldsymbol{\tau}_j, \quad (3.6)$$

dove \mathbf{L} è il momento angolare relativo della coppia di nucleoni. Si considerano anche termini quadratici nel momento angolare

$$O^{p=9,14} = \mathbf{L}^2, \mathbf{L}^2 \boldsymbol{\tau}_i \cdot \boldsymbol{\tau}_j, \mathbf{L}^2 \boldsymbol{\sigma}_i \cdot \boldsymbol{\sigma}_j, \mathbf{L}^2 \boldsymbol{\sigma}_i \cdot \boldsymbol{\sigma}_j \boldsymbol{\tau}_i \cdot \boldsymbol{\tau}_j. \quad (3.7)$$

La costruzione del potenziale fenomenologici avviene adottando per il potenziale un'espressione che è somma di termini dipendenti da vari operatori che rispettano le proprietà menzionate sopra. Escludendo termini che dipendono dalle derivate della posizione, l'espressione tipica di questi operatori è

$$V(i, j) = \sum_{p=1,18} v_p(r_{ij}) O_{ij}^p \quad (3.2)$$

dove $v_p(r_{ij})$ sono funzioni scalari della distanza tra i due nucleoni. I parametri di queste funzioni sono quelli che vengono variati per riprodurre al meglio i dati sperimentali. Gli operatori definiti centrali sono:

$$O^{p=1,4} = 1, \boldsymbol{\tau}_i \cdot \boldsymbol{\tau}_j, \boldsymbol{\sigma}_i \cdot \boldsymbol{\sigma}_j, \boldsymbol{\sigma}_i \cdot \boldsymbol{\sigma}_j \boldsymbol{\tau}_i \cdot \boldsymbol{\tau}_j, \quad (3.3)$$

quelli definiti tensoriali sono:

$$O^{p=5,6} = S_{ij}, S_{ij} \boldsymbol{\tau}_i \cdot \boldsymbol{\tau}_j, \quad (3.4)$$

dove il termine tensoriale è definito come

$$S_{ij} = 3 \frac{\boldsymbol{\sigma}_i \cdot \mathbf{r}_{ij} \boldsymbol{\sigma}_j \cdot \mathbf{r}_{ij}}{r_{ij}^2} - \boldsymbol{\sigma}_i \cdot \boldsymbol{\sigma}_j. \quad (3.5)$$

Ovviamente il termine tensoriale è il primo, il secondo termine viene aggiunto in modo che l'integrale angolare di S_{ij} sia nullo. Nel

I termini che violano l'invarianza per rotazione di isospin sono

$$O^{p=15,18} = [1, \boldsymbol{\sigma}_i \cdot \boldsymbol{\sigma}_j S_{ij}] \otimes [\tau_{z,i} + \tau_{z,j}] \quad (3.8)$$

Questa è la tipica struttura delle interazioni di tipo Urbana e Argonne. Le funzioni v_p sono parametrizzate utilizzando tre diversi raggi d'azione, corto, intermedio, lungo. Ognuna di queste parti ha una particolare espressione funzionale, ad esempio somma di Yukawiane (vedi sotto), e contiene i parametri da modificare per il *fit* ai dati sperimentali.

La figura 3.2 mostra i primi 8 termini dei potenziali Urbana V14, Argonne V8 e Argonne V18 in funzione della distanza tra i due nucleoni. Sono doverose due osservazioni. La prima è che, nonostante il numero di dati da riprodurre sia molto elevato, e tutti i potenziali producono descrizioni di questi dati con eguale accuratezza, infatti il χ^2 è per tutti circa 1 per dato sperimentale, le funzioni sono piuttosto diverse. Questo indica che i dati non impongono limitazioni sufficientemente stringenti da definire in maniera univoca, o comunque molto precisa, i potenziali. Significa che i dati sono correlati tra loro e possono essere riprodotti da opportune combinazioni delle varie funzioni operatoriali.

La seconda osservazione è che tutte le parametrizzazioni, nel canale scalare V_1 , presentano un nocciolo, *core*, fortemente repulsivo a piccole distanze, poi una piccola sacca attrattiva, e, infine si azzerano a distanze di 2 fm. La presenza del *core* repulsivo, comune a tutti i sistemi che possono essere considerati liquidi quantistici, rende inapplicabili le tradizionali tecniche perturbative.

3.3.2 Potenziali a scambio mesonico

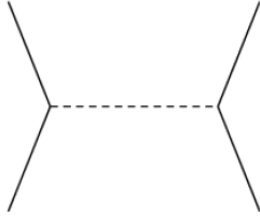


Figura 3.3: Schema dello scambio di un mesone tra due nucleoni.

Un approccio più ambizioso alla costruzione del potenziale nucleone-nucleone è quello che parte dall'idea di Yukawa e modella il potenziale in termini di scambio di mesoni. L'idea è che il raggio d'azione sia determinato dalla massa del mesone scambiato. La funzione che descrive il moto del mesone scambiato si chiama Yukawiana e ha l'espressione

$$V(r) = \frac{e^{-mr}}{r},$$

dove m è la massa del mesone scambiato e r è la distanza tra i due nucleoni che interagiscono. Evidentemente $V(r)$ tende più velocemente a zero più pesante è il mesone scambiato.

All'inizio degli anni '80 del secolo scorso si iniziarono a costruire potenziali nucleone-nucleone che sommarono i contributi di vari mesoni scambiati. La tabella 3.1 presenta le caratteristiche dei mesoni considerati nella costruzione di questi potenziali. Ogni mesone è caratterizzato da momento angolare e parità. Questo identifica il modo di accoppiarsi con nucleone. Le diverse masse del nucleone simulano i diversi raggi d'azione, mentre i diversi modi di accoppiarsi costruiscono le varie dipendenze operatoriali che nei potenziali fenomenologici sono prodotte dagli operatori O^p .

Lo scopo di questo programma di ricerca consiste nell'idea di conoscere quale mesone sia responsabile delle varie parti del potenziale nucleone-nucleone sia in termini di raggio d'azione, sia in termini operatoriali. Ad esempio, il pione, mesone π , essendo il più leggero è responsabile della parte a lungo raggio d'azione del potenziale. Inoltre, il suo accoppiamento pseudo-scalare è legato al canale tensore-isospin $O_{ij}^6 = S_{ij} \boldsymbol{\tau}_i \cdot \boldsymbol{\tau}_j$ dell'interazione. In effetti, osservando con attenzione la figura 3.2, si nota che il termine con maggior raggio d'azione è V_6 , proprio quello tensore-isospin.

L'ambizioso progetto di ricerca si scontra però con la limitatezza delle nostre conoscenze di fisica mesonica. Nel caso del pione, conosciamo massa, modalità di accoppiamento con i nucleoni, e anche il valore della costante di questo accoppiamento, l'intensità dell'interazione pione-nucleone. Quest'ultima informazione emerge dai numerosi dati di diffusione elastica pione-nucleone. Per gli altri mesoni, vista

Tipologia	J^π	accoppiamento	mesone	massa [MeV]
Pseudoscalare	0^-	γ_5	π	139.578
			η	548
			η'	958
Vettore	1^-	γ_μ	ρ	765
			ω	783
			ϕ	1019
Scalare	0^+	1	σ	500

Tabella 3.1: Mesoni usati per costruire il potenziale nucleone - nucleone.

la loro breve vita media, non è stato possibile effettuare questo tipo di esperimenti, quindi i valori delle costanti di accoppiamento con i nucleoni sono sconosciute. Nella composizione del potenziale, queste costanti sono considerate dei parametri liberi i cui valori sono fissati per riprodurre i dati empirici dei sistemi nucleari a due corpi. Nonostante l'ambizione iniziale, anche in questo caso si ricorre ad un processo di *fit* degli stessi dati sperimentali utilizzati per costruire i potenziali fenomenologici, e il numero di parametri utilizzato è confrontabile con quello usato dai potenziali fenomenologici.

A questo punto è importante far notare che per poter riprodurre i dati sperimentali dei sistemi a due corpi, è stato necessario introdurre un mesone fittizio, inesistente nel *Particle Data Book*, il mesone σ con accoppiamento scalare, che con la massa di 500 MeV (cifra tonda) descrive la sacca attrattiva della parte scalare del potenziale attorno ad 1, 1.5, fm. L'introduzione di questo mesone fittizio è un chiaro fallimento dell'ambizioso progetto teorico. In realtà questa costruzione è limitata allo scambio di singoli bosoni tra nucleoni. Calcoli che considerano anche lo scambio di due pioni indicano che il fittizio mesone σ simula, almeno in parte, lo scambio di due pioni accoppiati in onda s .

Questo non significa che i potenziali a scambio mesonico non presentino differenze, e vantaggi, rispetto ai potenziali fenomenologici. Innanzi tutto la formulazione dell'interazione nucleone-nucleone è relativistica, quindi invariante per trasformazioni di Lorentz. Questo significa che applicando operazioni di coniugazione di carica si ottiene automaticamente il potenziale tra anti-nucleoni e tra protone e anti-protone. Il confronto con i pochi dati sperimentali di questi sistemi di antiparticelle conferma il successo di questa costruzione del potenziale.

L'applicazione di questi potenziali in calcoli standard di struttura nucleare non è immediata. Questo tipo di calcoli richiede, di norma, potenziali non-relativistici e locali, cioè che non contengano termini legati alle derivate della posizione delle particelle. Questi potenziali sono relativistici, e sono normalmente formulati nello spazio degli impulsi, e dipendono separatamente dagli impulsi delle particelle che collidono, ovvero sono non-locali nello spazio delle coordinate. Per poter essere utilizzati in calcoli di struttura nucleare questi potenziali richiedono una riduzione non-relativistica e, spesso, anche un processo di eliminazione di termini non-locali.

3.3.3 Potenziali da teorie effettive chirali

Il più moderno, e forse ambizioso, metodo di modellizzazione dell'interazione tra due nucleoni viene da quelle che vengono definite *teorie effettive chirali*. L'idea è quella di costruire una teoria effettiva della QCD ad energie dell'ordine del MeV. Questo significa che le proprietà di simmetria della QCD sono rispettate, soprattutto quella che viene definita simmetria chirale. Su questa base si costruisce una lagrangiana basata sullo scambio di pioni a diversi ordini, ogni ordine contenente termini di contatto necessari per ripristinare la simmetria chirale. Al momento è necessario considerare termini fino al terzo ordine perturbativo per riuscire a riprodurre i dati nucleone-nucleone con $\chi^2 \simeq 1$. Anche questo modello contiene circa una ventina di parametri i cui valori vengono scelti facendo un *fit* dei dati sperimentali.

3.3.4 Forze a tre corpi

L'ipotesi fondamentale su cui si basa la costruzione dei potenziali nucleone-nucleone è quella che siano particelle puntiformi. Considerare il nucleone come entità puntiforme è un'approssimazione, che si spera valida nell'intervallo di energie di interesse per la fisica nucleare. Questa è l'ipotesi di base sulla quale vengono costruiti i potenziali a due corpi che ho descritto in precedenza.

Potenziale	2N	2n+3N
CD Bonn	7.953	8.483
Nijm II	7.709	8.477
Nijm I	7.731	8.480
Nijm 93	7.664	8.480
Reid 93	7.648	8.480
AV14	7.683	8.480
AV18	7.567	8.479

Tabella 3.2: Energia di legame del ^3H , in MeV, calcolata con diversi potenziali nucleone-nucleone a due corpi e poi ottenuta inserendo una interazione a tre corpi appropriata. Il valore sperimentale dell'energia di legame del ^3H è 8.481 MeV.

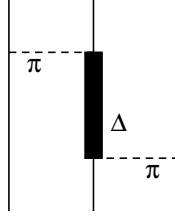


Figura 3.4: Termine dell'interazione a tre corpi detto di Fujita-Miyazawa.

Poiché i sistemi a due corpi sono utilizzati per costruire l'interazione, il primo sistema su cui verificare le proprietà predittive di questa costruzione, è il trizio, il nucleo di ^3H , costituito da due neutroni e da un protone. Questo sistema è ideale per verificare la bontà dei potenziali nucleone-nucleone perché l'interazione elettromagnetica è assente e quindi solo l'interazione forte è attiva.

Le procedure per risolvere l'equazione di Schrödinger per un sistema a tre corpi non sono standardizzate come quelle per i due corpi. È comunque possibile risolvere il problema senza fare alcuna approssimazione. Recentemente sono stati confrontati i risultati riguardanti il calcolo dell'energia di legame del ^3H ottenuta con sette diverse tecniche. All'interno delle incertezze numeriche, i risultati combaciavano.

Il risultato fondamentale di questo calcolo consiste nell'osservare che l'uso dei potenziali nucleari costruiti riproducendo i sistemi a due corpi, non riesce a descrivere correttamente l'energia di legame del ^3H . Questo è un risultato che dipende solo dall'interazione poiché l'equazione di Schrödinger viene risolta senza alcuna approssimazione. La tabella 3.2 mostra i risultati ottenuti utilizzando vari potenziali. Il primo punto di interesse è che questi potenziali sono equivalenti nel riprodurre i dati dei sistemi a due corpi, ma generano diversi risultati per il sistema a tre corpi. Questo ribadisce quanto affermato precedentemente, ovvero il *fit* ai dati dei sistemi a due corpi non è sufficientemente restrittivo sull'interazione. Il secondo punto di interesse riguarda il fatto che tutti i valori delle energie ottenute con un potenziale a due corpi sono inferiori al valore empirico dell'energia di legame.

Dato che varie tecniche di calcolo producono lo stesso risultato, e che usando potenziali a due corpi differenti si ottengono sempre risultati che generano energie di legame inferiori a quelle sperimentali, non rimane che attribuire il fallimento della descrizione del sistema a tre corpi all'hamiltoniana, e più precisamente all'ipotesi che i nucleoni siano particelle puntiformi.

L'esempio più semplice della modifica necessaria per correggere l'hamiltoniana è presentato nella figura 3.4. Gli stati iniziale e finale di questo sistema sono formati da nucleoni. Il nucleone intermedio dopo l'interazione con il nucleone alla sua sinistra, interazione qui mediata dallo scambio di un π , si trasforma in una nuova particella, una risonanza Δ . Mentre si trova in questo stato interagisce con il nucleone che

sta alla sua sinistra, e si ritrasforma in un nucleone. Questo tipo di processo è possibile perché il nucleone ha una struttura interna e, interagendo, può trasformarsi in un'altra particella. Nel caso di un gas di elettroni questi fenomeni non avvengono perché gli elettroni non hanno struttura interna. Questo tipo di processo può avvenire solo se sono coinvolti tre nucleoni, non è possibile descrivere questi processi iterando interazioni a due corpi.

L'inserimento di interazioni a tre corpi trasforma l'hamiltoniana in

$$H = \sum_{i=1}^A \frac{-\hbar^2}{2m_i} \nabla_i^2 + \sum_{i<j}^A V(i, j) + \sum_{i<j<k}^A w(i, j, k) , \quad (3.9)$$

dove il primo termine rappresenta l'energia cinetica, il secondo quello indotto dall'interazione a due corpi, definita per riprodurre sistemi a due corpi, e il terzo termine è il potenziale a tre corpi. Nel potenziale a tre corpi al termine descritto dalla figura 3.4, detto di Fujita-Miyazawa, si aggiunge un altro termine puramente fenomenologico i cui parametri sono fissati per riprodurre l'energia di legame del ^3H .

Visto che l'hamiltoniana con soli termini a due corpi non riesce a riprodurre anche il più semplice sistema a tre corpi, è legittima la preoccupazione che dopo aver inserito un termine a tre corpi sia necessario inserirne a quattro, cinque, ecc. Fortunatamente l'hamiltoniana (3.9) riesce a descrivere molto bene anche nuclei contenente più di tre nucleoni, come verrà mostrato nel Capitolo 4.

Le forze a multicorpi diventano più importanti quanto maggiore diventa la probabilità per un certo numero di particelle di essere sufficientemente vicine da poter interagire. Ricordo che l'interazione forte è a corto-raggio. A densità fissata, la probabilità di interazione a multicorpi diminuisce con l'aumentare del numero di particelle coinvolte. Questo è il motivo per il quale, alle densità nucleari, forze a quattro o più corpi sono trascurabili rispetto a quelle a tre e a due.

3.4 Liquidi e gas fortemente interagenti

La differenza essenziale tra la situazione descritta per il caso nucleare e quella riguardante l'interazione inter-molecolare necessaria per descrivere liquidi e gas fortemente interagenti è che, in questo secondo caso, l'interazione fondamentale è l'interazione elettromagnetica. Contrariamente al caso dell'interazione forte, le equazioni che descrivono l'interazione elettromagnetica per il tramite della teoria elettrodinamica quantistica (QED) sono risolte con i massimi livelli di precisione raggiunti dalla fisica teorica. Quindi, in principio, è possibile descrivere l'interazione tra atomi o tra molecole usando la QED e partendo dall'interazione elettromagnetica tra i componenti di questi sistemi, ovvero nuclei ed elettroni.

Questa descrizione microscopica dell'interazione inter-atomica o inter-molecolare viene effettuata usando l'hamiltoniana (3.1) della sezione 3.2 in cui si esplicita l'espressione del potenziale di Coulomb. Gli elettroni dei vari atomi che compongono la molecola sono privi di struttura interna, e si ipotizza che lo siano anche i nuclei. Quest'ultima approssimazione è abbastanza ben giustificata dato che le energie in gioco sono dell'ordine dell'eV, mentre quelle necessarie per sondare la struttura nucleare sono dell'ordine del MeV.

I calcoli della struttura molecolare vengono normalmente fatti fissando la distanza tra i nuclei degli atomi che compongono la molecola e risolvendo l'equazione di Schrödinger che descrive il moto degli elettroni. Questa è, in sostanza, l'approssimazione di Born-Oppenheimer. I calcoli vengono ripetuti per diversi valori delle distanze tra i nuclei fino a quando si trova la situazione di minima energia che corrisponde allo stato fondamentale della molecola. Da questi calcoli è possibile estrarre il potenziale di interazione tra le due molecole.

La descrizione di un sistema a multicorpi partendo dall'interazione elettromagnetica tra i suoi componenti è un programma fattibile in linea di principio ma difficilmente attuabile dal punto di vista pratico, e probabilmente esageratamente ambizioso rispetto agli scopi che ci si propone.

Così come per i nuclei i nucleoni sono stati considerati puntiformi, la descrizione dei liquidi e dei gas fortemente interagenti viene fatta trascurando la struttura interna delle molecole che li compongono. Quello che interessa è l'interazione effettiva tra questi gradi di libertà, ben diversa dall'interazione Coulombiana che la genera.

In fisica molecolare, le forze che operano tra gli atomi vengono classificate come (a) legame di valenza, (b) legame ionico, (c) legame metallico e (d) forze di van der Waals. Le forze di tipo (a), attive, ad esempio, nel diamante, e (b), queste attive, ad esempio, nel NaCl, sono così intense che, alle temperature ordinarie, i composti formano strutture solide. Non le consideriamo dato che non ci occuperemo di strutture cristalline. Il legame metallico forma quel gas di elettroni che è stato discusso nel paragrafo (3.1). Ci concentriamo quindi sulle forze di van der Waals che sono responsabili di quelle sostanze che a temperature ordinarie sono allo stato liquido. Queste sono anche le forze attive nei liquidi di elio superfluido, sia nel caso bosonico, composto da atomi con nuclei di ^4He , sia nel caso fermionico, composto da nuclei di ^3He .

Il sistema che consideriamo è composto da molecole ben strutturate che non condividono elettroni tra loro. Nel caso le molecole siano composte da atomi differenti, o da atomi con una forte asimmetria della nuvola elettronica, esiste una polarizzazione delle cariche positive e negative in due diverse posizioni dello spazio. Queste molecole presentano momenti di multipolo elettrici permanenti, ad esempio dipoli, quadrupoli, ecc. Le interazioni tra molecole possono essere pensate come interazioni tra multipoli elettrici.

Anche nel caso in cui i baricentri delle cariche positive e negative coincidono, e questo avviene normalmente quando le molecole sono composte dagli stessi atomi che hanno una simmetria sferica della distribuzione di elettroni, l'interazione tra molecole può essere descritta in termini di forza elettromagnetica tra multipoli elettrici. Questo perché l'avvicinarsi di due molecole implica una distorsione delle nuvole elettroniche.

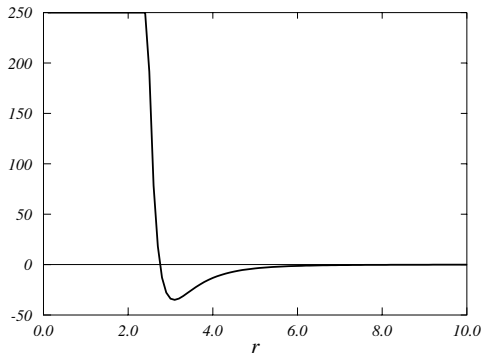


Figura 3.5: Potenziale di Lennard-Jones per il Ne, espresso in K. Le distanze sono in Å.

risce utilizzare una strategia analoga a quella adottata per l'interazione tra due nucleoni. L'interazione tra le molecole è descritta da un'espressione analitica di tipo parametrico, ed i valori dei parametri sono fissati per riprodurre dati empirici che descrivono i sistemi di due molecole, principalmente, i dati di diffusione elastica.

Particolarmente utilizzato in letteratura è il potenziale di *Lennard-Jones* la cui espressione analitica è

$$V(r) = 4\epsilon \left\{ \left(\frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r} \right)^6 \right\} \quad (3.10)$$

dove r è la distanza tra le molecole, che consideriamo puntiformi, e ϵ e σ sono i due parametri.

A grandi distanze, l'interazione tra le due molecole è nulla dato che, globalmente, le molecole sono neutre, e i baricentri delle loro distribuzioni di carica positiva e negativa sono visti come fossero nello stesso punto. Questa caratteristica inserisce l'interazione inter-molecolare nel gruppo delle interazioni a rango finito, come discusso per l'interazione tra due nucleoni. A distanze intermedie, l'interazione è, in prima approssimazione, quella tra due dipoli elettrici, quindi essenzialmente attrattiva. Infine, a piccole distanze, le nubi elettroniche cominciano a sovrapporsi e quindi si ha repulsione. Nella figura 3.5 è presentato il potenziale di interazione tra due atomi di neon. Come si vede la struttura è analoga a quella del potenziale nucleone-nucleone. Invece di ottenere questa interazione partendo dall'interazione Coulombiana tra i vari componenti delle due molecole interagenti, si preferisce

L'interazione tra due molecole è molto più semplice di quella tra due nucleoni: è puramente scalare, cioè non dipende dallo spin delle due molecole e dal valore del momento angolare relativo. L'espressione (3.10) è estremamente semplice ma racchiude tutta la fisica importante che deve essere considerata.

	Ne	Ar	Kr	Xe	N ₂	CH
σ (Å)	2.75	3.405	3.60	4.10	3.70	3.82
ϵ (K)	35.6	119.8	171	221	95.1	148.2

Tabella 3.3: Parametri del potenziale di Lennard-Jones per alcuni atomi e molecole.

Mentre nel caso nucleare, l'interazione fissata come indicato nel paragrafo 3.3, viene usata per descrivere qualsiasi nucleo, nel caso molecolare è necessario definire i valori dei parametri dell'interazione per ogni tipo di molecola. Nella tabella 3.3 mostro, ad esempio, i valori dei parametri scelti per alcune molecole.

Tutta questa descrizione è valida fino a quando rimane valida l'ipotesi che le molecole non abbiano struttura interna. Abbiamo visto come nel caso dei nucleoni questa approssimazione perda validità e sia necessario inserire interazioni a tre corpi. L'ipotesi che le hamiltoniane in fisica molecolare siano composte solo da termini di interazione a due corpi viene definita normalmente come *additività di coppia* (pairwise additivity). La validità di questa ipotesi è uno dei problemi ampiamente discussi nell'ambito della fisica statistica e molecolare (si veda ad esempio la discussione nel paragrafo 4.3.b di [Goo85]).

Dal punto di vista dell'intuizione fisica, ci sono due quantità da considerare per valutare l'importanza di forze a molticorpi: l'energia di eccitazione del grado di libertà ipotizzato puntiforme, e la densità relativa del sistema. La prima quantità deve essere confrontata con le energie del sistema. Ad esempio, il valore empirico dell'energia di legame di materia nucleare è circa 16 MeV per nucleone. La prima risonanza del nucleone è la Δ , la cui massa è circa 300 MeV più grande di quella del nucleone. Questo significa che la struttura interna del nucleone comincia ad essere significativa a circa 18 volte le energie del sistema. Le energie tipiche del sistema di elio superfluido sono di circa 2 μ eV, mentre il primo stato eccitato dell'atomo di He si trova a circa 20 eV. Si tratta di 7 ordini di grandezza di differenza. Considerando queste differenze è evidente che l'ipotesi di trascurare la struttura interna dei gradi di libertà è molto più appropriata nell'elio liquido che in materia nucleare.

Come accennato nel paragrafo 3.3.4, l'importanza delle forze a molticorpi dipende anche dalla probabilità che le particelle si trovino a distanze sufficientemente piccole per poter interagire, ovvero nel raggio di interazione delle forze che, come abbiamo visto, sono a corto raggio. Per poter stimare questa probabilità è utile considerare quante particelle si trovano nel volume definito dal core fortemente repulsivo dell'interazione. Nel riquadro, calcolo queste densità relative per materia nucleare, che indica 0.084 nucleoni nel volume di interesse, a fronte di 2.317 atomi di elio nel caso dell'elio liquido. Dal punto di vista delle densità relative, l'elio liquido è molto più denso della materia nucleare, quindi la probabilità che tre atomi di elio si trovino ad interagire tra loro contemporaneamente è sicuramente maggiore nell'elio liquido che in materia nucleare.

Densità relative

Nell'ambito delle teorie a molticorpi sono rilevanti le densità relative, ovvero il numero di particelle, considerate prive di struttura interna, che si trovano in un volume caratterizzato dalle dimensioni del core fortemente repulsivo del potenziale.

1. Materia nucleare.

In questo caso il raggio del core fortemente repulsivo dell'interazione è $\sigma \simeq 0.5$ fm. Il volume di riferimento è

$$V = \frac{4}{3}\pi\sigma^3 = 0.524 \text{ fm}^3$$

Empiricamente si trova che la densità d'equilibrio della materia nucleare è di 0.6 nucleoni per fm^3 . Il numero di nucleoni che si trovano nel volume di interesse è

$$N = \rho V = (0.16) \frac{\text{nucleoni}}{\text{fm}^3} (0.524) \text{ fm}^3 = 0.084 \text{ nucleoni}$$

2. *Elio liquido.*

La densità di massa dell'elio liquido è $1.47 \cdot 10^5 \text{ g m}^{-3}$. Il peso molecolare è 4 g mole^{-1} , ovvero il peso di un numero di Avogadro di atomi di elio. La densità in numero dell'elio liquido è

$$\rho = \frac{1.47 \cdot 10^5 \text{ g}}{\text{m}^3} \frac{6.2 \cdot 10^{23}}{4 \text{ g}} = \frac{2.263 \cdot 10^{28} \text{ atomi}}{\text{m}^3}$$

Nell'elio le dimensioni del core fortemente repulsivo sono $\sigma = 2.9 \text{ \AA} = 2.9 \cdot 10^{-10} \text{ m}$. Il volume della sfera avente raggio σ è $V = 1.024 \cdot 10^{-28} \text{ m}^3$. Il numero di atomi nel volume interessato è $(V\rho) = 2.317$.

Parte II

Soluzioni senza approssimazioni

Capitolo 4

Tecniche Monte Carlo

Lo sviluppo della tecnologia elettronica di questi ultimi decenni ha enormemente aumentato le capacità di eseguire calcoli numerici. Questi sviluppi tecnologici hanno permesso il diffondersi di tecniche di calcolo Monte Carlo. Il nome Monte Carlo indica un uso del computer che si basa sulla sua capacità di produrre sequenze di numeri casuali. Queste sequenze vengono utilizzate in vari modi, ad esempio, per simulare il comportamento di sistemi complessi, come l'evoluzione temporale di una popolazione o il funzionamento di rivelatori ed acceleratori di particelle.

In queste note discuterò come le tecniche Monte Carlo sono utilizzate nell'ambito della fisica dei sistemi a molticorpi. Queste tecniche permettono di risolvere l'equazione di Schrödinger che descrive il sistema senza fare approssimazioni. Le uniche limitazioni di questi calcoli sono di tipo numerico, cioè legate agli algoritmi numerici utilizzati.

L'uso del Monte Carlo in questo ambito è legato alla possibilità di effettuare integrali multidimensionali in breve tempo. Prima presenterò l'idea di base dell'integrazione numerica con tecniche Monte Carlo, e poi varie implementazioni nell'ambito della soluzione del problema a molticorpi.

4.1 Integrazioni Numeriche

Se consideriamo soltanto le coordinate spaziali, la funzione d'onda $|\Psi\rangle$ di un sistema di A particelle, è caratterizzata da $3A$ variabili, tre per identificare la posizione di ogni particella. Questo significa che il calcolo dell'energia

$$E = \frac{\langle \Psi | H | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle}, \quad (4.1)$$

implica integrali a $3A$ dimensioni. Consideriamo una griglia uniforme di coordinate cartesiane, ed indichiamo con N il numero dei punti di questa griglia, il numero degli integrali da calcolare è $N^{3A-1} + 1$. Il numero di punti adottato nell'uso delle comuni tecniche di integrazione a una dimensione, regola dei trapezi, Simpson, ecc., è dell'ordine del centinaio. Anche ipotizzando tempi estremamente ridotti per ogni integrale, ad esempio 10^{-6} s, si vede come sia difficile utilizzare queste tecniche per descrivere sistemi a molte particelle. Il calcolo di un sistema con $A=4$ richiederebbe 10^6 s, circa quattro mesi di calcolo ininterrotto, con $A=5$ circa 400 anni.

Il calcolo degli integrali con tecniche Monte Carlo non è molto conveniente per integrali ad una dimensione, perchè richiede molto più tempo macchina per ottenere accuratizie confrontabili con quelle ottenute con tecniche tradizionali. D'altra parte, è l'unica tecnica che permetta di effettuare stime degli integrali a molte dimensioni in tempi ragionevoli.

Presento qui la tecnica per il caso ad una dimensione, che verrà banalmente generalizzata, nel caso di integrali a più dimensioni.

Supponiamo di voler calcolare il seguente integrale definito

$$\int_a^b f(u) du = (b-a) \int_0^1 f(x) dx , \quad (4.2)$$

dove ho ridefinito la variabile di integrazione come

$$x = \frac{u-a}{b-a} . \quad (4.3)$$

Dal punto di vista numerico si stima il valore dell'integrale sommando valori di f calcolati in N punti casuali della variabile di integrazione x ,

$$I = \int_0^1 f(x) dx \simeq \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N f(x_i) . \quad (4.4)$$

La stima di I sarà tanto più vicina al valore corretto dell'integrale quanto più grande sarà il valore di N .

Il numero sufficiente di punti per ottenere stime sempre più accurate del valore dell'integrale dipende dal comportamento di f nel dominio di integrazione. Se questo andamento è molto liscio, pochi punti saranno sufficienti per avere una buona stima dell'integrale. Nel caso in cui f fosse una costante, basterebbe un solo punto.

Una strategia utile per rendere più liscio l'andamento della funzione integranda, consiste nel moltiplicarla, e dividerla, per una funzione peso P , definita sempre maggiore di zero nell'intervallo di integrazione, che si comporta come una densità di probabilità

$$\int_0^1 P(x) dx = 1 , \quad (4.5)$$

quindi

$$I = \int_0^1 f(x) dx = \int_0^1 \frac{f(x)}{P(x)} P(x) dx = \int_0^1 F(x) P(x) dx . \quad (4.6)$$

Definisco una nuova variabile

$$y(x) = \int_0^x P(x') dx' ; \quad \frac{dy(x)}{dx} = P(x) ; \quad y(0) = 0 ; \quad y(1) = 1 , \quad (4.7)$$

quindi

$$I = \int_0^1 f(x) dx = \int_0^1 F(x) P(x) dx = \int_0^1 F(x(y)) dy \simeq \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \frac{f(x(y_i))}{P(x(y_i))} . \quad (4.8)$$

La scelte opportune di P sono quelle che rendono il rapporto f/P quasi costante. Il problema consiste nell'inversione della (4.7), che potrebbe non essere banale.

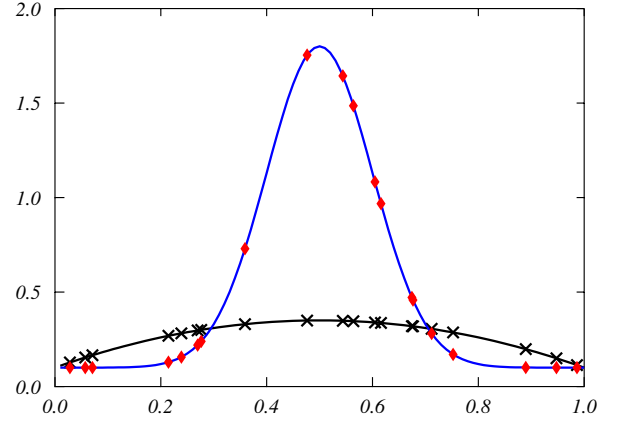


Figura 4.1: Funzioni da integrare con il metodo Monte Carlo. I punti rossi e le croci nere indicano i punti delle due funzioni selezionati con una scelta casuale dei valori di x .

A questo punto interviene un teorema, detto **Teorema del limite centrale**, che descrive la distribuzione dei valori approssimati di I . Il teorema afferma che, data la distribuzione dei valori di S_N

$$S_N = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N F(x) , \quad (4.9)$$

per valori molto grandi di N si ha

$$\lim_{N \rightarrow \infty} P(S_N) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma_N^2}} \exp\left(-\frac{(S_N - \langle F \rangle)^2}{2\sigma_N^2}\right) , \quad (4.10)$$

dove ho definito

$$\langle F \rangle = \int_0^1 F(x)P(x)dx \quad ; \quad \langle F^2 \rangle = \int_0^1 F^2(x)P(x)dx \quad ; \quad \sigma_N^2 = \frac{1}{N} (\langle F^2 \rangle - \langle F \rangle^2) . \quad (4.11)$$

Il teorema è basato sul fatto che la variabili x sono equiprobabili. Il risultato del teorema indica che il valore di I ha, per N abbastanza grande, una distribuzione gaussiana attorno al valore atteso. L'ampiezza della distribuzione è σ_N e scala come $N^{-1/2}$. Quindi

$$I = \int_0^1 f(x) dx = \int_0^1 F(x)P(x) dx = \int_0^1 F(x(y)) dy \simeq \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \frac{f(x(y_i))}{P(x(y_i))} \pm \sigma_N \quad (4.12)$$

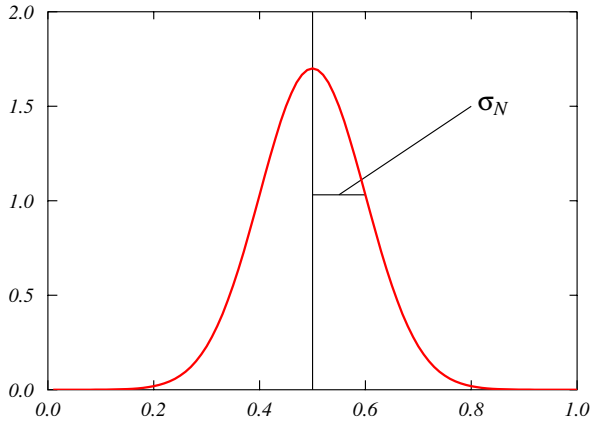


Figura 4.2: Distribuzione gaussiana attorno al valore centrale.

Questa tecnica può essere estesa ad integrali multidimensionali. L'incertezza gaussiana è indipendente dal numero di dimensioni.

L'idea di base è quella di applicare questa tecnica per il calcolo dell'energia (4.1), o, più in generale, per quello del valore di aspettazione di un operatore qualsiasi \mathcal{O} tra due stati a multicorpi.

4.2 Monte Carlo Variazionale (VMC)

Una prima applicazione delle tecniche Monte Carlo per calcoli di integrali a molte dimensioni è basata sul principio variazionale.

La ricerca del minimo del funzionale dell'energia (4.1) equivale a risolvere l'equazione di Schrödinger (vedi l'Appendice B). Nelle applicazioni pratiche, la ricerca del minimo viene effettuata considerando solo funzioni d'onda che abbiano precise espressioni funzionali. Questa limitazione restringe la ricerca del minimo in un sottospazio

di Hilbert ristretto, e per questo motivo la soluzione dell'equazione di Schrödinger è approssimata ed il valore dell'energia ottenuto in questo modo è sempre maggiore, solo in casi ideali uguale, al valore dell'energia che si otterrebbe senza alcuna approssimazione.

Nel caso dei calcoli VMC la funzione d'onda di prova viene costruita in analogia a quanto fatto nella teoria della Funzione di Base Correlata , (si veda il capitolo 12),

$$|\Psi_T\rangle = F|\Phi\rangle \quad (4.13)$$

dove $|\Phi\rangle$ è un determinante di Slater e F è una funzione di correlazione. La funzione di correlazione è definita secondo l'ipotesi detta di Jastrow, cioè come prodotto di funzioni di correlazione a due corpi

$$F = \prod_{i < j}^A f(r_{ij}) . \quad (4.14)$$

Abbiamo visto che una caratteristica tipica delle interazioni dei sistemi a molti corpi è la presenza di un core fortemente repulsivo a piccole distanze tra le due particelle interagenti. Lo scopo della correlazione f è quello di impedire che queste due particelle si avvicinino nella zona del core repulsivo. Per questo motivo la funzione di correlazione f di due particelle è circa zero per piccole distanze relative, e tende ad uno per distanze maggiori del raggio d'azione delle forze, che ricordo sono a corto raggio.

La complessità dell'interazione nucleone-nucleone, richiede, in fisica nucleare, di usare espressioni della correlazione che dipendono dai vari termini operatoriali, in analogia all'espressione dell'interazione presentata nel Paragrafo 3.3.1

$$F = \mathcal{S} \prod_{i < j}^A \left(\sum_p f^p(r_{ij}) O_{ij}^p \right) , \quad (4.15)$$

dove \mathcal{S} è un operatore che rende simmetrico F per lo scambio di due indici i, j . Questo è necessario poiché il determinante di Slater Φ è già antisimmetrizzato per lo scambio di due fermioni, e gli operatori O^p , in generale, non commutano tra loro. Le espressioni degli operatori sono quelle presentate nel Paragrafo 3.3.1.

Le funzioni d'onda che sono utilizzate nei calcoli VMC sono espresse come

$$|\Psi(\mathbf{r}), S, T\rangle \equiv \sum_{s=1,2^A} \sum_{t=1,2^A} \mathcal{R}_{s,t}(\mathbf{R}) \mathcal{X}_s(S) \mathcal{X}_t(T) , \quad (4.16)$$

dove \mathcal{R} indica la parte radiale della funzione d'onda, \mathbf{R} rappresenta l'insieme di tutte le coordinate spaziali che descrivono i fermioni del sistema, e con \mathcal{X}_s e \mathcal{X}_t ho indicato la parte della funzione d'onda che descrive i termini di spin, S e isospin, T . Questa parte della funzione d'onda descrive tutte le possibili combinazioni di spin e isospin possibili nel sistema formato da A nucleoni. Per un nucleo con Z protoni e $A - Z$ neutroni, il numero di queste combinazioni è dato da

$$N_{\text{conf}} = 2^A \frac{A!}{Z!(A-Z)!} . \quad (4.17)$$

I valori di N_{conf} ottenuti per alcuni nuclei di interesse sono stati presentati nella tabella 4.1.

Come abbiamo visto, nel Paragrafo 3.3.1, in fisica nucleare si può esprimere l'interazione tra due nucleoni utilizzando un'espressione del tipo

$$V(i, j) = \sum_p v^p(r_{ij}) O_{ij}^p , \quad (4.18)$$

dove le v^p sono funzioni scalari della coordinata relativa tra le due particelle interagenti. Gli elementi di matrice dell'interazione (4.18) sono direttamente calcolabili per stati nella rappresentazione (4.16).

Consideriamo, ad esempio, il termine dipendente dallo spin, $p=3$ in (4.15). Usando le tradizionali matrici di Pauli

$$\sigma_x \equiv \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} , \quad \sigma_y \equiv \begin{pmatrix} 0 & i \\ i & 0 \end{pmatrix} , \quad \sigma_z \equiv \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} , \quad (4.19)$$

posso definire gli operatori ascendenti e discendenti come

$$\sigma_+ \equiv \frac{1}{2} (\sigma_x + i\sigma_y) \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} , \quad \sigma_- \equiv \frac{1}{2} (\sigma_x - i\sigma_y) \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad (4.20)$$

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 4.1: Numero di configurazioni di spin e isospin per alcuni nuclei.

la cui azione sugli autostati di spin è

$$\sigma_+|\downarrow\rangle = |\uparrow\rangle ; \sigma_+|\uparrow\rangle = 0 ; \sigma_-|\downarrow\rangle = 0 ; \sigma_-|\uparrow\rangle = |\downarrow\rangle ; \sigma_z|\uparrow\rangle = |\uparrow\rangle ; \sigma_z|\downarrow\rangle = -|\downarrow\rangle . \quad (4.21)$$

Per semplificare la scrittura ho indicato con $|\uparrow\rangle$ la funzione d'onda di spin con componente $1/2$ sull'asse z , e con $|\downarrow\rangle$ quella con componente $-1/2$.

Posso esprimere il prodotto scalare dei due operatori di spin come somma di operatori ascendenti e discendenti

$$\boldsymbol{\sigma}(1) \cdot \boldsymbol{\sigma}(2) = 2[\sigma_+(1)\sigma_-(2) + \sigma_+(2)\sigma_-(1)] + \sigma_z(1)\sigma_z(2) . \quad (4.22)$$

Considerando, ad esempio, il caso di tre particelle fermioniche, ottengo

$$\boldsymbol{\sigma}(1) \cdot \boldsymbol{\sigma}(2) \begin{pmatrix} (\downarrow_1\downarrow_2\downarrow_3) \\ (\uparrow_1\downarrow_2\downarrow_3) \\ (\downarrow_1\uparrow_2\downarrow_3) \\ (\uparrow_1\uparrow_2\downarrow_3) \\ (\downarrow_1\downarrow_2\uparrow_3) \\ (\uparrow_1\downarrow_2\uparrow_3) \\ (\downarrow_1\uparrow_2\uparrow_3) \\ (\uparrow_1\uparrow_2\uparrow_3) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} (\downarrow_1\downarrow_2\downarrow_3) \\ 2(\downarrow_1\uparrow_2\downarrow_3) - (\uparrow_1\downarrow_2\downarrow_3) \\ 2(\uparrow_1\downarrow_2\downarrow_3) - (\downarrow_1\uparrow_2\downarrow_3) \\ (\uparrow_1\uparrow_2\downarrow_3) \\ (\downarrow_1\downarrow_2\uparrow_3) \\ 2(\downarrow_1\uparrow_2\uparrow_3) - (\uparrow_1\downarrow_2\uparrow_3) \\ 2(\uparrow_1\downarrow_2\uparrow_3) - (\downarrow_1\uparrow_2\uparrow_3) \\ (\uparrow_1\uparrow_2\uparrow_3) \end{pmatrix} , \quad (4.23)$$

dove ho utilizzato i pedici per identificare la particella, e ho messo parentesi tonde per indicare il prodotto di tre autostati di spin.

Il calcolo dell'energia non ha problemi formali, e consiste nel calcolare il valore di aspettazione dell'hamiltoniana

$$E = \langle H \rangle = \frac{\langle \Psi_T | H | \Psi_T \rangle}{\langle \Psi_T | \Psi_T \rangle} . \quad (4.24)$$

Il principio variazionale si applica cercando il minimo di questo funzionale di energia. I termini che possono variare sono le funzioni d'onda ϕ_i di singola particella che formano il determinante di Slater, e le funzioni scalari f della correlazione.

Nel calcolo dell'energia (4.24), e più in generale del valore di aspettazione di un qualsiasi operatore \mathcal{O} , il modulo della funzione d'onda $|\Psi|^2$ gioca il ruolo della funzione peso $P(x)$ presentata nella sezione precedente. La funzione d'onda Ψ di un sistema fermionico è antisimmetrica per lo scambio di due particelle. Questo significa che scambiando due particelle la funzione d'onda cambia di segno. Dato che Ψ è una funzione continua, esistono dei valori di \mathbf{R} per i quali la funzione d'onda è nulla, quindi è nullo anche il modulo quadro. Evidentemente questi punti nei quali la funzione $P(x)$ è nulla creano

problemi nel calcolo dell'integrale (4.12). Questo problema, noto in letteratura come problema del segno, viene affrontato con tecniche approssimate. Questo inserisce nel calcolo di sistemi fermionici alcune approssimazioni di principio, assenti nel caso di sistemi bosonici.

4.3 Green Function Monte Carlo (GFMC)

I limiti del calcolo VMC sono legati al fatto di dover scegliere un'espressione specifica della funzione d'onda di prova. Nel caso presentato sopra, si tratta dell'espressione (4.13) che propone una funzione d'onda di prova composta dal prodotto di un solo determinante di Slater moltiplicato per una funzione di correlazione, che a sua volta ha un'espressione particolare. La tecnica GFMC risolve l'equazione di Schrödinger senza fare alcuna restrizione dell'espressione della funzione d'onda a multicorpi. Questa tecnica è indipendente da parametri o ipotesi di partenza, ma dipende solo dall'hamiltoniana, cioè dall'interazione.

Riscrivo la funzione d'onda di prova come combinazione lineare di autostati dell'hamiltoniana H

$$|\Psi_T\rangle = \sum_n D_n |\Psi_n\rangle, \quad (4.25)$$

dove i coefficienti D_n sono numeri. Utilizzo un operatore di evoluzione temporale nel quale considero un tempo immaginario τ . Faccio evolvere la funzione d'onda di prova per un valore infinito del tempo immaginario

$$\lim_{\tau \rightarrow \infty} e^{-\frac{H-E_0}{\hbar}\tau} |\Psi_T\rangle = \lim_{\tau \rightarrow \infty} e^{-\frac{H-E_0}{\hbar}\tau} \sum_n D_n |\Psi_n\rangle = \lim_{\tau \rightarrow \infty} \sum_n e^{-\frac{E_n-E_0}{\hbar}\tau} D_n |\Psi_n\rangle = D_0 |\Psi_0\rangle, \quad (4.26)$$

questo perché per $n \neq 0$ si ha $E_n > E_0$, dove quest'ultima è l'energia dello stato fondamentale del sistema. Considero l'evoluzione in piccoli incrementi temporali $d\tau$ di uno stato in rappresentazione delle coordinate $|\mathbf{R}\rangle$

$$\Psi(\mathbf{R}, \tau + d\tau) \equiv \langle \mathbf{R} | \Psi(\tau + d\tau) \rangle = \langle \mathbf{R} | e^{-(H-E_0)\frac{d\tau}{\hbar}} | \Psi(\tau) \rangle = \int d\mathbf{R}' \underbrace{\langle \mathbf{R} | e^{-(H-E_0)\frac{d\tau}{\hbar}} | \mathbf{R}' \rangle}_{\text{propagatore}} \langle \mathbf{R}' | \Psi(\tau) \rangle, \quad (4.27)$$

dove ho considerato la completezza

$$\int d\mathbf{R}' |\mathbf{R}'\rangle \langle \mathbf{R}'| = 1.$$

Considero l'hamiltoniana $H = T + V$, e faccio l'ipotesi che il potenziale V sia diagonale in \mathbf{R} , ovvero che sia locale. Questo significa che i termini operatoriali del potenziale non contengono derivate rispetto ad \mathbf{R} . Questa è una delle richieste fondamentali dei calcoli Monte Carlo. Per semplificare i calcoli è conveniente utilizzare un'espressione approssimata dell'esponenziale detta Formula di Trotter-Suzuki

$$e^{-(T+V-E_0)\frac{d\tau}{\hbar}} = e^{-\frac{1}{2}(V-E_0)\frac{d\tau}{\hbar}} e^{-T\frac{d\tau}{\hbar}} e^{-\frac{1}{2}(V-E_0)\frac{d\tau}{\hbar}} + O(d\tau^3), \quad (4.28)$$

valida per

$$|d\tau^3(TV - VT)| \ll 1. \quad (4.29)$$

Considerando questa espressione, e trascurando i termini in $d\tau^3$, ottengo

$$\begin{aligned} \Psi(\mathbf{R}, \tau + d\tau) &\simeq \int \langle \mathbf{R} | e^{-\frac{1}{2}(V-E_0)\frac{d\tau}{\hbar}} | \mathbf{R} \rangle \langle \mathbf{R} | e^{-T\frac{d\tau}{\hbar}} | \mathbf{R}' \rangle \langle \mathbf{R}' | e^{-\frac{1}{2}(V-E_0)\frac{d\tau}{\hbar}} | \mathbf{R} \rangle \Psi(\mathbf{R}', \tau) d\mathbf{R}' \\ &= \int e^{-[\frac{1}{2}(V(\mathbf{R})+V(\mathbf{R}'))-E_0]\frac{d\tau}{\hbar}} \langle \mathbf{R} | e^{-T\frac{d\tau}{\hbar}} | \mathbf{R}' \rangle \Psi(\mathbf{R}', \tau) d\mathbf{R}'. \end{aligned} \quad (4.30)$$

Definisco i propagatori

$$G_V(\mathbf{R} \leftarrow \mathbf{R}') = e^{-\left[\frac{1}{2}(V(\mathbf{R})+V(\mathbf{R}'))-E_0\right]\frac{d\tau}{\hbar}} , \quad (4.31)$$

$$G_0(\mathbf{R} \leftarrow \mathbf{R}') = \langle \mathbf{R} | e^{-T\frac{d\tau}{\hbar}} | \mathbf{R}' \rangle . \quad (4.32)$$

Calcolo il propagatore libero G_0 usando l'equazione di Schrödinger dipendente da τ , il tempo immaginario

$$\hbar \frac{\partial}{\partial \tau} \Phi(\mathbf{R}, \tau) - \frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Phi(\mathbf{R}, \tau) = 0 . \quad (4.33)$$

Per risolvere questa equazione uso la trasformata di Fourier in $n = 3A$ dimensioni

$$\tilde{\Phi}(\mathbf{K}, \tau) = \int d\mathbf{R} e^{-i\mathbf{K} \cdot \mathbf{R}} \Phi(\mathbf{R}, \tau) , \quad (4.34)$$

che soddisfa l'equazione

$$\hbar \frac{\partial}{\partial \tau} \tilde{\Phi}(\mathbf{K}, \tau) + \frac{\hbar^2 \mathbf{K}^2}{2m} \tilde{\Phi}(\mathbf{K}, \tau) = 0 , \quad (4.35)$$

con

$$\tilde{\Phi}(\mathbf{K}, \tau) = \tilde{\Phi}(\mathbf{K}, 0) \exp\left(-\frac{\hbar^2 \mathbf{K}^2}{2m} \frac{\tau}{\hbar}\right) = \tilde{\Phi}(\mathbf{K}, 0) \tilde{g}(\mathbf{K}, \tau) , \quad (4.36)$$

dove ho definito

$$\tilde{g}(\mathbf{K}, \tau) = \exp\left(-\frac{\hbar \mathbf{K}^2}{2m} \tau\right) . \quad (4.37)$$

Per il teorema del prodotto di convoluzione, l'equazione (4.36) può essere considerata come il risultato del prodotto di convoluzione di Φ e g nello spazio delle coordinate, quindi, in questo spazio, posso scrivere

$$\Phi(\mathbf{R}, \tau) = \int d\mathbf{R}' \Phi(\mathbf{R}', 0) g(\mathbf{R}' - \mathbf{R}, \tau) d\mathbf{R}' , \quad (4.38)$$

e ottenere g nello spazio delle coordinate come antitrasformata

$$g(\mathbf{R}, \tau) = \frac{1}{(2\pi)^n} \int d\mathbf{K} e^{i\mathbf{K} \cdot \mathbf{R}} e^{-\frac{\hbar \tau}{2m} \mathbf{K}^2} = \frac{\exp(-2m\mathbf{R}^2/4\hbar\tau)}{(2\frac{\hbar\tau}{2m})^{n/2}} , \quad (4.39)$$

quindi

$$\Phi(\mathbf{R}, \tau) = \frac{1}{(\hbar\tau/m)^{n/2}} \int d\mathbf{R}' \exp\left[-\frac{m}{2\hbar\tau}(\mathbf{R} - \mathbf{R}')^2\right] \Phi(\mathbf{R}', 0) , \quad (4.40)$$

e il propagatore libero può essere espresso come

$$G_0(\mathbf{R} \leftarrow \mathbf{R}', \tau) = \left(\frac{\hbar\tau}{m}\right)^{-n/2} \exp\left[-\frac{m}{2\hbar\tau}(\mathbf{R} - \mathbf{R}')^2\right] . \quad (4.41)$$

L'evoluzione della funzione d'onda totale data dall'equazione (4.30) come prodotto dei propagatori libero e correlato, assume l'espressione

$$\begin{aligned} \Psi(\mathbf{R}, \tau + \Delta\tau) &\simeq \int d\mathbf{R}' \exp\left\{\left[-\frac{1}{2}(V(\mathbf{R}') + V(\mathbf{R})) - E_0\right]\frac{\Delta\tau}{\hbar}\right\} \\ &\quad \times \left(\frac{\hbar}{m}\Delta\tau\right)^{n/2} \exp\left[-\frac{m}{2\hbar\Delta\tau}(\mathbf{R} - \mathbf{R}')^2\right] \Psi(\mathbf{R}', \tau) . \end{aligned} \quad (4.42)$$

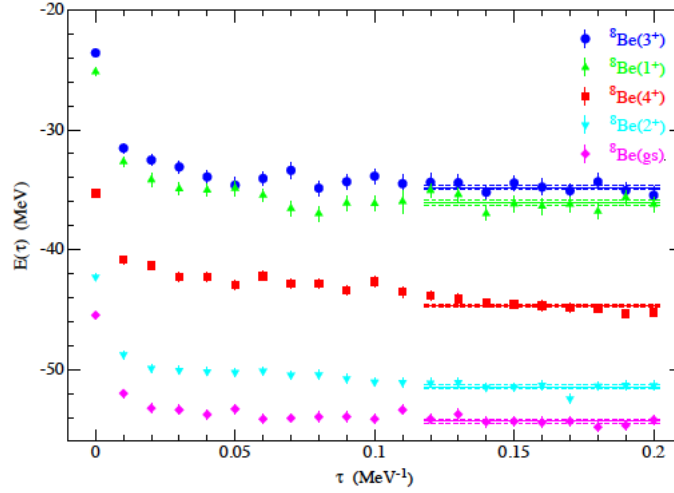


Figura 4.3: Convergenza dei risultati GFMC in funzione del crescere del valore del tempo immaginario τ .

Per il calcolo del valore di aspettazione di un operatore qualsiasi si usa una rappresentazione mista nella quale sono presenti sia lo stato di prova che quello ottenuto facendo evolvere il tempo fino al valore τ . Definendo \mathbf{R}_n l'insieme di coordinate spaziali al tempo τ_n e

$$\mathbf{P}_n = \mathbf{R}_n \mathbf{R}_{n-1} \mathbf{R}_{n-2} \cdots \mathbf{R}_0, \quad (4.43)$$

posso esprimere il valore di aspettazione in rappresentazione mista come

$$\langle \mathcal{O} \rangle_{\text{mix}} = \frac{\langle \Psi_T | \mathcal{O} | \Psi(\tau) \rangle}{\langle \Psi_T | \Psi(\tau) \rangle} = \frac{\int d\mathbf{P}_n \Psi_T^\dagger(\mathbf{R}_n) \mathcal{O} G(\mathbf{R}_n, \mathbf{R}_{n-1}) \cdots G(\mathbf{R}_1, \mathbf{R}_0) \Psi_T(\mathbf{R}_0)}{\int d\mathbf{P}_n \Psi_T^\dagger(\mathbf{R}_n) G(\mathbf{R}_n, \mathbf{R}_{n-1}) \cdots G(\mathbf{R}_1, \mathbf{R}_0) \Psi_T(\mathbf{R}_0)}, \quad (4.44)$$

dove il propagatore G è dato dal prodotto di G_v e G_0 . Con buona approssimazione il valore di aspettazione dell'operatore \mathcal{O} è dato da

$$\langle \mathcal{O} \rangle \simeq \langle \mathcal{O} \rangle_{\text{mix}} + [\langle \mathcal{O} \rangle_{\text{mix}} - \langle \mathcal{O} \rangle_T]. \quad (4.45)$$

Nella Figura 4.3 si mostra l'andamento delle energie di vari stati del ^8B , calcolati con GFMC, in funzione del tempo immaginario τ . Si vede che il valore delle energie diminuisce con l'aumentare del tempo fino a raggiungere un valore costante, come indicato dall'equazione di evoluzione (4.3). Questo metodo può essere applicato per identificare le energie minime di ogni stato caratterizzato da un momento angolare e parità. Nel caso del ^8B , nucleo con numero pari di protoni e neutroni, lo stato fondamentale è caratterizzato da 0^+ .

Le differenze tra calcoli VMC e GFMC sono mostrate nelle tabelle 4.2 e 4.3 e nella Figura 4.4. I risultati delle due tabelle mostrano per i liquidi di elio bosonico, tabella 4.2, e fermionico, tabella 4.2, la sensibilità dei risultati VMC alla scelta della funzione d'onda di prova Ψ_T . D'altra parte i calcoli GFMC sono indipendenti da questa scelta e producono energie inferiori a quelle del VMC, confermando la limitazione formale del principio variazionale, e più vicini ai valori sperimentali. Considerazioni analoghe possono essere fatte anche per quanto riguarda i risultati mostrati in Figura 4.4 per le energie di legame di nuclei leggeri.

L'effetto dell'inserimento della forza a tre corpi nell'hamiltoniana nucleare è mostrato nella Figura 4.5.

Metodo	Funzione di prova	Energie (K)
VMC	McMillan	-5.72(2)
VMC	PPA	-5.93(1)
VMC	Shadow	-6.24(4)
VMC	McMillan + 3B	-6.65(2)
VMC	OPT + 3B	-6.79(1)
GFMC	McMillan	-7.12(3)
Exp.	-	-7.14

Tabella 4.2: Energie, espresse in K, dell' ^4He liquido calcolate con VMC and GFMC utilizzando diverse funzioni d'onda di prova. Exp. è l'energia sperimentale. Dati presi dalla referenza [Sch92].

Metodo	Funzione di prova	Energie (K)
VMC	McMillan	-1.08(2)
VMC	2B + 3B	-1.61(3)
VMC	2B + BF	-1.55(4)
VMC	2B + 3B + BF	-2.15(3)
GFMC	2B + 3B + BF	-2.44(4)
Exp.	-	-2.47

Tabella 4.3: Energie, espresse in K, dell' ^3He liquido calcolate con VMC and GFMC utilizzando diverse funzioni d'onda di prova. Exp. è l'energia sperimentale. Dati presi dalla referenza [Sch92].

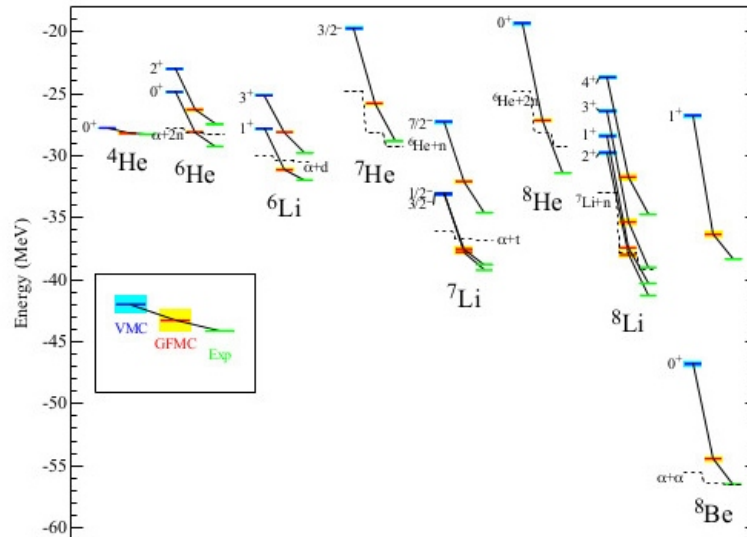


Figura 4.4: Confronto tra i risultati VMC e GFMC per nuclei leggeri [Car05].

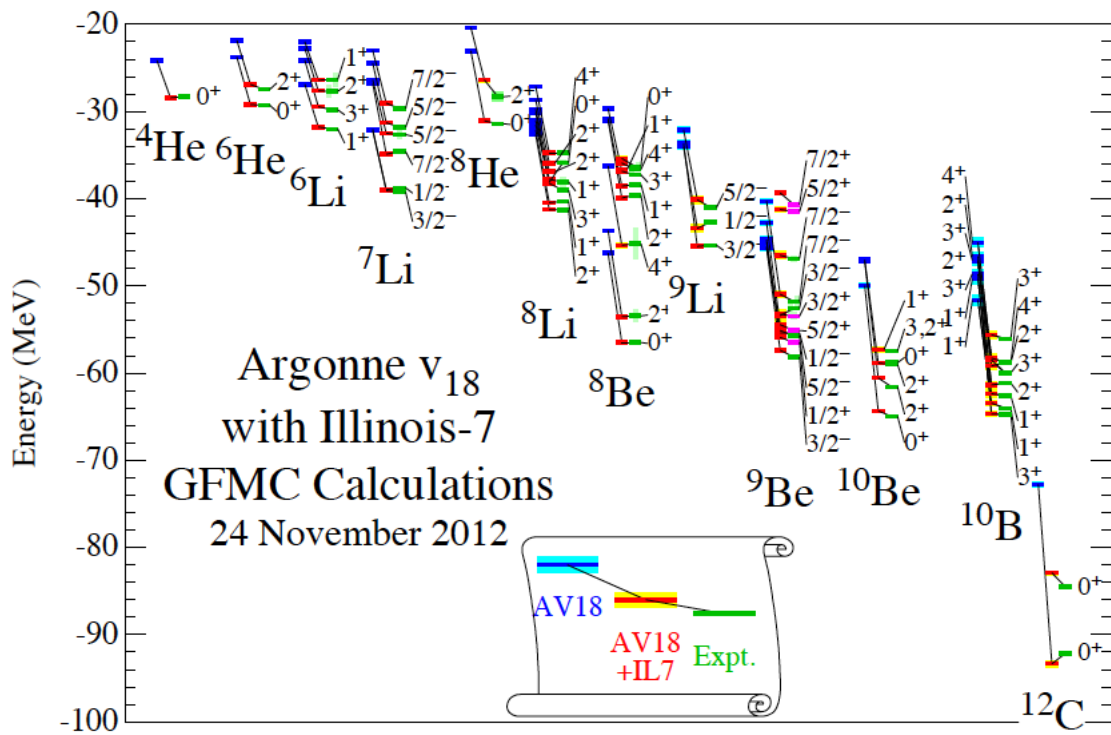


Figura 4.5: Effetto dell'inserimento dell'interazione a 3 corpi nell'hamiltoniana. [Car05].

Parte III

Teorie ispirate alla Teoria dei Campi

Capitolo 5

Rappresentazione dei numeri di occupazione

5.1 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 l'uso di questi operatori 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 A particelle è descritto dalla funzione d'onda che soddisfa l'equazione di Schrödinger indipendente dal tempo:

$$H\Psi(x_1, x_2 \dots x_A) = E\Psi(x_1, x_2 \dots x_A) \quad (5.1)$$

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:

$$\Psi(\dots x_i, \dots, x_j \dots) = -\Psi(\dots x_j, \dots, x_i \dots) \quad (5.2)$$

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:

$$\Psi = \sum_i C_i \Phi_i, \quad (5.3)$$

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:

$$h_\nu \phi_\nu(x) = \epsilon_\nu \phi_\nu(x), \quad (5.4)$$

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 A particelle viene costruito come:

$$\Phi(x_1, \dots, x_A) = \frac{1}{\sqrt{A!}} \sum_P (-)^P \phi_{\nu_1}(x_1) \phi_{\nu_2}(x_2) \dots \phi_{\nu_N}(x_A), \quad (5.5)$$

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

$$\langle \Phi | \Phi \rangle = 1. \quad (5.6)$$

L'eq. (5.5) può essere scritta come

$$\Phi(x_1 \dots x_A) = \frac{1}{\sqrt{A!}} \begin{vmatrix} \phi_{\nu_1}(x_1) & \dots & \phi_{\nu_A}(x_1) \\ \vdots & & \vdots \\ \phi_{\nu_1}(x_A) & \dots & \phi_{\nu_A}(x_A) \end{vmatrix}. \quad (5.7)$$

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

$$\sum_\nu h_\nu \Phi = H_0 \Phi = \mathcal{E}_0 \Phi. \quad (5.8)$$

5.2 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:

$$|\Phi\rangle \longrightarrow |\nu_A, \nu_{A-1} \dots \nu_1\rangle. \quad (5.9)$$

L'ordine normalmente utilizzato è quello dell'energia crescente dello stato di singola particella. A ν_A 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

$$|\phi_\nu\rangle \equiv |\nu\rangle, \quad (5.10)$$

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

$$|\nu\rangle = a_\nu^+ |0\rangle, \quad (5.11)$$

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

In generale si ha che:

$$a_\nu^+ |\nu_A \dots \nu_1\rangle = |\nu \nu_A \dots \nu_1\rangle. \quad (5.12)$$

Lo stato di $A + 1$ 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. (5.12).

Ad esempio:

$$a_{\nu_1}^+ |\nu_3 \nu_2\rangle = |\nu_1 \nu_3 \nu_2\rangle = -|\nu_3 \nu_1 \nu_2\rangle = |\nu_3 \nu_2 \nu_1\rangle . \quad (5.13)$$

Dalle equazioni (5.11) e (5.12) segue che:

$$|\nu_A \dots \nu_1\rangle = a_{\nu_A}^+ a_{\nu_{A-1}}^+ \dots a_{\nu_1}^+ |0\rangle . \quad (5.14)$$

Per le proprietà del determinante di Slater si ha che:

$$a_{\nu'}^+ |\nu_A \dots \nu \dots \nu_1\rangle = 0. \quad (5.15)$$

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. (5.15) esprime il principio di esclusione di Pauli.

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

$$a_{\nu_1}^+ a_{\nu_2}^+ = -a_{\nu_2}^+ a_{\nu_1}^+ \quad (5.16)$$

Per dimostrare l'eq. (5.16) supponiamo $\nu > \nu'$

$$\begin{aligned} a_{\nu'}^+ a_{\nu}^+ \Phi^A(A \dots \dots 1) &= \theta_{\nu'}^I a_{\nu}^+ \Phi^{A+1}(A \dots \nu' \dots 1) = \theta_{\nu'}^I \theta_{\nu}^I \Phi^{A+2}(A \dots \nu \dots \nu' \dots 1) \\ a_{\nu}^+ a_{\nu'}^+ \Phi^A(A \dots \dots 1) &= \theta_{\nu}^{II} a_{\nu'}^+ \Phi^{A+1}(A \dots \nu \dots 1) = \theta_{\nu}^{II} \theta_{\nu'}^{II} \Phi^{A+2}(A \dots \nu \dots \nu' \dots 1) \end{aligned} \quad (5.17)$$

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

$$a_{\nu'}^+ a_{\nu}^+ \Phi = -a_{\nu}^+ a_{\nu'}^+ \Phi \quad (5.18)$$

da cui l'equazione operatoriale (5.16). Ovviamente l'equazione (5.16) implica che:

$$(a_{\nu}^+)^2 = 0 \quad (5.19)$$

che è un altro modo di esprimere l'eq. (5.15).

Si può definire l'aggiunto dell'operatore a^+ la cui azione può essere compresa facendo l'aggiunto dell'eq. (5.11).

$$(a_{\nu}^+)^+ = a_{\nu} \quad (5.20)$$

$$|\nu\rangle = a_{\nu}^+ |0\rangle \quad \langle \nu| = \langle 0| a_{\nu} \quad (5.21)$$

$$\langle \nu_1 \nu_2 \dots \nu_N | = \langle 0| a_{\nu_1} \dots a_{\nu_{N-1}} a_{\nu_N} \quad (5.22)$$

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

$$\langle 0| \underbrace{a_{\nu} a_{\nu}^+}_{|0\rangle} |0\rangle = 1 \quad (5.23)$$

quindi,

$$\begin{aligned} |0\rangle &= a_\nu a_\nu^+ |0\rangle \\ &= a_\nu |\nu\rangle = |0\rangle \end{aligned} \quad (5.24)$$

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_r} .

$$a_{\nu_r} |\nu_A \dots \nu_{r+1} \nu_r \nu_{r-1} \dots \nu_1\rangle = |\nu_A \dots \nu_{r+1} \nu_{r-1} \dots \nu_1\rangle (-)^{r-1} \quad \text{se } \nu = \nu_r \quad (5.25)$$

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

$$a_\nu |0\rangle = 0. \quad (5.26)$$

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

$$a_\nu |\nu_A \dots \nu_1\rangle = 0. \quad (5.27)$$

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

$$a_{\nu_1} a_{\nu_2} = -a_{\nu_2} a_{\nu_1} \quad \text{quindi} \quad (a_\nu)^2 = 0. \quad (5.28)$$

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

$$a_{\nu_1} a_{\nu_2}^+ = -a_{\nu_2}^+ a_{\nu_1}. \quad (5.29)$$

Utilizzando le proprietà precedentemente mostrate si ottiene:

$$a_\nu a_\nu^+ |\nu_A \dots \nu_1\rangle = \begin{cases} 0 & \text{se } \nu \in S \\ |\nu_A \dots \nu_1\rangle & \text{se } \nu \notin S \end{cases} \quad S = \{\nu_A \dots \nu_1\} \quad (5.30)$$

$$a_\nu^+ a_\nu |\nu_A \dots \nu_1\rangle = \begin{cases} |\nu_A \dots \nu_1\rangle & \text{se } \nu \in S \\ 0 & \text{se } \nu \notin S \end{cases} \quad (5.31)$$

Dalle equazioni (5.30) e (5.31) si ha che:

$$(a_\nu a_\nu^+ + a_\nu^+ a_\nu) |\nu_A \dots \nu_1\rangle = |\nu_A \dots \nu_1\rangle. \quad (5.32)$$

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

L'eq. (5.31) definisce l'operatore numero di occupazione:

$$n_\nu = a_\nu^+ a_\nu \quad (5.33)$$

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 (5.30) e (5.31) è:

$$a_\nu a_\nu^+ + a_\nu^+ a_\nu = 1 \quad (5.34)$$

Le relazioni (5.16), (5.28), (5.29) che definiscono le proprietà degli operatori di creazione e di distruzione, possono essere sintetizzate come:

$$\{a_\nu, a_{\nu'}^+\} = \delta_{\nu\nu'} \quad \{a_\nu, a_{\nu'}\} = 0 \quad \{a_\nu^+, a_{\nu'}^+\} = 0, \quad (5.35)$$

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 C.

5.3 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 $O_S(x_1 \dots x_A)$. Si ottiene l'espressione corrispondente O di questo operatore nella RNO imponendo l'uguaglianza degli elementi di matrice:

$$\langle \Phi_{S'} | O_S | \Phi_S \rangle = \langle S' | O | S \rangle \quad (5.36)$$

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;

$$O^I(x_1 \dots x_A) = \sum_{i=1}^A o^I(x_i) \quad (5.37)$$

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

$$o^I(x)\phi_\nu(x) = \omega_\nu\phi_\nu(x). \quad (5.38)$$

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

$$\begin{aligned} O^I(x_1 \dots x_A) \Phi_S(x_1 \dots x_A) &= \\ &= \frac{1}{\sqrt{A!}} \sum_P (-)^P \sum_{i=1}^A o^I(x_i) P \phi_{\nu_1}(x_1) \dots \phi_{\nu_A}(x_A) = \\ &= \frac{1}{\sqrt{A!}} \sum_P (-)^P \sum_{i=1}^A P o^I(x_i) \phi_{\nu_1}(x_1) \dots \phi_{\nu_A}(x_A) \\ &= \frac{1}{\sqrt{A!}} \sum_P (-)^P \sum_{i=1}^A (\omega_{\nu_i} P \phi_{\nu_1}(x_1) \dots \phi_{\nu_A}(x_A)) \\ &= \sum_{i=1}^A \omega_{\nu_i} \Phi_S = \sum_{\nu \text{ occupati}} \omega_\nu \Phi_S = \sum_{\nu} \omega_\nu n_\nu \Phi_S \end{aligned} \quad (5.39)$$

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:

$$\langle \Phi_{S'} | O^I | \Phi_S \rangle = \sum_{\nu} \omega_\nu n_\nu \langle \Phi_{S'} | \Phi_S \rangle = \quad (5.40)$$

$$= \sum_{\nu} \omega_\nu \langle S' | n_\nu | S \rangle = \langle S' | O^I | S \rangle \quad (5.41)$$

dove è stato usato l'operatore numero di occupazione definito in eq. (5.31). Sostituendo si ha che:

$$\langle S' | O^I | S \rangle = \langle S' | \sum_{\nu} \omega_\nu a_\nu^+ a_\nu | S \rangle \quad (5.42)$$

da cui:

$$O^I = \sum_{\nu\nu} \omega_{\nu\nu} a_\nu^+ a_\nu \quad (5.43)$$

dove

$$\omega_{\nu\nu'} = \int d^3r \phi_\nu^*(\mathbf{r}) o^I(\mathbf{r}) \phi_{\nu'}(\mathbf{r}). \quad (5.44)$$

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

$$O^I = \sum_{\nu\nu'} O_{\nu\nu'}^I a_\nu^+ a_{\nu'} \quad (5.45)$$

$$O_{\nu\nu'}^I = \int d^3x \phi_\nu^*(\mathbf{x}) o^I(\mathbf{x}) \phi_{\nu'}(\mathbf{x}) \equiv \langle \nu | o^I | \nu' \rangle \quad (5.46)$$

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:

$$O^{II}(x_1 \dots x_A) = \sum_{i < j} o^{II}(x_i, x_j) = \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} o^{II}(x_i, x_j) \quad (5.47)$$

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:

$$O^{II} = \frac{1}{2} \sum_{\nu\nu'\mu\mu'} O_{\nu\mu\nu'\mu'}^{II} a_\nu^+ a_\mu^+ a_{\mu'} a_{\nu'}, \quad (5.48)$$

in cui abbiamo definito:

$$O_{\nu\mu\nu'\mu'}^{II} = \langle \nu\mu | O^{II} | \nu'\mu' \rangle = \int dx dx' \phi_\nu^*(x) \phi_\mu^*(x') o^{II}(x, x') \phi_{\nu'}(x) \phi_{\mu'}(x') \quad (5.49)$$

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.

5.4 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.

$$\psi(\mathbf{r}) = \sum_\nu a_\nu \phi_\nu(\mathbf{r}) \quad \text{distrugge una particella nel punto } \mathbf{r} \quad (5.50)$$

$$\psi^+(\mathbf{r}) = \sum_\nu a_\nu^+ \phi_\nu^*(\mathbf{r}) \quad \text{crea una particella nel punto } \mathbf{r}. \quad (5.51)$$

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.

$$a_\nu = \int d^3r \phi_\nu^*(\mathbf{r}) \psi(\mathbf{r}) \quad \text{e} \quad a_\nu^+ = \int d^3r \phi_\nu(\mathbf{r}) \psi^+(\mathbf{r}) \quad (5.52)$$

Utilizzando le proprietà di anticommutazione (5.35) degli operatori di creazione e distruzione, si ottengono analoghe relazioni per gli operatori di campo:

$$\{\psi^+(\mathbf{r}), \psi^+(\mathbf{r}')\} = 0 \quad \{\psi(\mathbf{r}), \psi(\mathbf{r}')\} = 0 \quad \{\psi^+(\mathbf{r}), \psi(\mathbf{r}')\} = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \quad (5.53)$$

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

$$O^I = \int d^3r \psi^+(\mathbf{r}) o^I(\mathbf{r}) \psi(\mathbf{r}) \quad (5.54)$$

$$O^{II} = \frac{1}{2} \int d^3r d^3r' \psi^+(\mathbf{r}) \psi^+(\mathbf{r}') O^{II}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \psi(\mathbf{r}') \psi(\mathbf{r}) \quad (5.55)$$

L'operatore hamiltoniano può essere espresso come:

$$H = T + V = \sum_{\nu\nu'} \langle \nu | T | \nu' \rangle a_\nu^\dagger a_{\nu'} + \frac{1}{2} \sum_{\nu\nu'\mu\mu'} \langle \nu\mu | V | \nu'\mu' \rangle a_\nu^\dagger a_\mu^\dagger a_{\mu'} a_{\nu'} \quad (5.56)$$

$$= \int d^3r \psi^+(\mathbf{r}) \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \right) \psi(\mathbf{r}) + \frac{1}{2} \int d^3r d^3r' \psi^+(\mathbf{r}) \psi^+(\mathbf{r}') V(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \psi(\mathbf{r}') \psi(\mathbf{r}). \quad (5.57)$$

Capitolo 6

Teoria perturbativa dei sistemi a molti corpi

6.1 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:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\Psi_S(t)\rangle = H |\Psi_S(t)\rangle, \quad (6.1)$$

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 (6.1) è:

$$|\Psi_S(t)\rangle = e^{-i \frac{H(t-t_0)}{\hbar}} |\Psi_S(t_0)\rangle. \quad (6.2)$$

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, $e^{\frac{i}{\hbar}H}$ è unitario.

L'equazione (6.2) 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:

$$|\Psi_H(t)\rangle \equiv e^{i\frac{Ht}{\hbar}} |\Psi_S(t)\rangle. \quad (6.3)$$

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

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\Psi_H(t)\rangle &= -He^{i\frac{Ht}{\hbar}} |\Psi_S(t)\rangle + e^{i\frac{Ht}{\hbar}} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\Psi_S(t)\rangle = \text{per la (6.1)} \\ &= -He^{i\frac{Ht}{\hbar}} |\Psi_S(t)\rangle + He^{i\frac{Ht}{\hbar}} |\Psi_S(t)\rangle = 0 \end{aligned} \quad (6.4)$$

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:

$$\langle \Psi_S(t) | O_S | \Psi_S(t) \rangle = \langle \Psi_H | e^{i\frac{Ht}{\hbar}} O_S e^{-i\frac{Ht}{\hbar}} | \Psi_H \rangle, \quad (6.5)$$

da cui si ottiene la definizione:

$$O_H \equiv e^{i\frac{Ht}{\hbar}} O_S e^{-i\frac{Ht}{\hbar}} \quad (6.6)$$

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

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} O_H(t) &= -He^{i\frac{Ht}{\hbar}} O_S e^{-i\frac{Ht}{\hbar}} + e^{i\frac{Ht}{\hbar}} O_S H e^{-i\frac{Ht}{\hbar}} = \\ &= -HO_H + O_H H = [O_H, H] \end{aligned} \quad (6.7)$$

dove si è sfruttato il fatto che H e $e^{i\frac{Ht}{\hbar}}$ commutano. In generale, O_H e H non commutano. Nel caso commutino, allora l'equazione (6.7) indica che O_H è 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 molticorpi.

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

$$H = H_0 + H_1. \quad (6.8)$$

Definiamo un vettore di stato in rappresentazione di interazione come:

$$|\Psi_I(t)\rangle \equiv e^{i\frac{H_0 t}{\hbar}} |\Psi_S(t)\rangle. \quad (6.9)$$

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

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\Psi_I(t)\rangle &= -H_0 e^{i\frac{H_0 t}{\hbar}} |\Psi_S(t)\rangle + e^{i\frac{H_0 t}{\hbar}} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\Psi_S(t)\rangle \\ &= e^{i\frac{H_0 t}{\hbar}} [-H_0 + H_0 + H_1] e^{-i\frac{H_0 t}{\hbar}} e^{i\frac{H_0 t}{\hbar}} |\Psi_S(t)\rangle = \\ &= e^{i\frac{H_0 t}{\hbar}} H_1 e^{-i\frac{H_0 t}{\hbar}} |\Psi_I(t)\rangle = H_{1,I}(t) |\Psi_I(t)\rangle \end{aligned} \quad (6.10)$$

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:

$$\langle \Psi_S(t) | O_S | \Psi_S(t) \rangle = \langle \Psi_I | e^{i\frac{H_0 t}{\hbar}} O_S e^{-i\frac{H_0 t}{\hbar}} | \Psi_I \rangle \quad (6.11)$$

da cui si ottiene la definizione:

$$O_I(t) = e^{i\frac{H_0 t}{\hbar}} O_S e^{-i\frac{H_0 t}{\hbar}} \quad (6.12)$$

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:

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} O_I(t) &= -H_0 e^{i\frac{H_0 t}{\hbar}} O_S e^{-i\frac{H_0 t}{\hbar}} + e^{i\frac{H_0 t}{\hbar}} O_S H_0 e^{-i\frac{H_0 t}{\hbar}} \\ &= e^{i\frac{H_0 t}{\hbar}} O_S e^{-i\frac{H_0 t}{\hbar}} H_0 - H_0 e^{i\frac{H_0 t}{\hbar}} O_S e^{-i\frac{H_0 t}{\hbar}} \\ &= O_I H_0 - H_0 O_I = [O_I(t), H_0] \end{aligned} \quad (6.13)$$

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.

$$H_0 = \sum_k \hbar \omega_k a_k^+ a_k \quad (6.14)$$

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

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

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:

$$i\hbar \frac{d}{dt} a_{I,k}(t) = \hbar \omega_k a_{I,k}(t) \quad (6.15)$$

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

$$a_{I,k}(t) = a_{S,k} e^{-i\omega_k t}. \quad (6.16)$$

Per l'aggiunto si ottiene:

$$a_{I,k}^+(t) = a_{S,k}^+ e^{i\omega_k t} \quad (6.17)$$

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.

6.2 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 .

$$|\Psi_I(t)\rangle = U(t, t_0)|\Psi_I(t_0)\rangle \quad (6.18)$$

Dalla definizione di stato in rappresentazione di interazione e dall'equazione (6.2) 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:

$$U(t, t_0) = e^{i\frac{H_0 t}{\hbar}} e^{-i\frac{H(t-t_0)}{\hbar}} e^{-i\frac{H_0 t_0}{\hbar}} \quad (6.19)$$

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

$$U(t_0, t_0) = 1, \quad (6.20)$$

e anche:

$$U^+(t, t_0)U(t, t_0) = U(t, t_0)U^+(t, t_0) = 1 \quad (6.21)$$

che implica:

$$U^+(t, t_0) = U^{-1}(t, t_0) \quad (6.22)$$

$$U(t_1, t_2)U(t_2, t_3) = U(t_1, t_3) \quad (6.23)$$

$$U(t, t_0)U(t_0, t) = 1 \quad \text{che implica} \quad U(t_0, t) = U^+(t, t_0). \quad (6.24)$$

L'equazione (6.19) non è molto utile per il calcolo di osservabili. Dal punto di vista della complessità di calcolo, risolvere l'eq. (6.18) utilizzando l'espressione (6.19) 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 (6.10)

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\Psi_I(t)\rangle = H_1(t) |\Psi_I(t)\rangle \quad (6.25)$$

dove $H_1(t)$ è il termine dell'hamiltoniana in rappresentazione di interazione a cui, per semplicità di scrittura, ho tolto il sottoindice I . Usando la (6.18) ottengo:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} U(t, t_0) |\Psi_I(t_0)\rangle = H_1(t) U(t, t_0) |\Psi_I(t_0)\rangle. \quad (6.26)$$

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

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} U(t, t_0) = H_1(t) U(t, t_0) \quad (6.27)$$

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 (6.20) si ha:

$$U(t, t_0) = 1 - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t dt' H_1(t') U(t', t_0) \quad (6.28)$$

La soluzione formale dell'equazione (6.28) si ottiene sostituendo al posto di $U(t', t_0)$ l'equazione stessa:

$$\begin{aligned} U(t, t_0) &= 1 - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t dt' H_1(t') \left[1 - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^{t'} dt'' H_1(t'') [1 - \dots] \right] \\ U(t, t_0) &= 1 - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t dt' H_1(t') + \left(\frac{-i}{\hbar} \right)^2 \int_{t_0}^t dt' \int_{t_0}^{t'} dt'' H_1(t') H_1(t'') + \dots \end{aligned} \quad (6.29)$$

$t > t'$

Consideriamo il terzo termine dell'equazione:

$$\int_{t_0}^t dt' \int_{t_0}^{t'} dt'' H_1(t') H_1(t'') = \frac{1}{2} \int_{t_0}^t dt' \int_{t_0}^{t'} dt'' H_1(t') H_1(t'') + \frac{1}{2} \int_{t_0}^t dt'' \int_{t_0}^{t''} dt' H_1(t'') H_1(t') \quad (6.30)$$

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

Nella parte destra dell'equazione (6.30) ho cambiato solo l'ordine degli indici muti. Dato che in generale si ha che:

$$\int_a^b dy \int_y^b dx f(x) f(y) = \int_a^b dx \int_a^x dy f(x) f(y) \quad (6.31)$$

l'eq. (6.30) può essere scritta come segue:

$$\begin{aligned} \int_{t_0}^t dt' \int_{t_0}^{t'} dt'' H_1(t') H_1(t'') &= \\ \frac{1}{2} \int_{t_0}^t dt' \int_{t_0}^{t'} dt'' H_1(t') H_1(t'') + \frac{1}{2} \int_{t_0}^t dt' \int_{t'}^t dt'' H_1(t'') H_1(t') &= \\ \frac{1}{2} \int_{t_0}^t dt' \int_{t_0}^{t'} dt'' [H_1(t') H_1(t'') \theta(t' - t'') + H_1(t'') H_1(t') \theta(t'' - t')] &= \\ \frac{1}{2} \int_{t_0}^t dt' \int_{t_0}^{t'} dt'' T [H_1(t') H_1(t'')] & \end{aligned} \quad (6.32)$$

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 (6.32) per un termine qualsiasi, si ottiene per l'eq. (6.29) l'espressione

$$U(t, t_0) = \sum_{n=0}^{\infty} \left(\frac{-i}{\hbar} \right)^n \frac{1}{n!} \int_{t_0}^t dt_1 \dots \int_{t_0}^t dt_n T [H_1(t_1) \dots H_1(t_n)]. \quad (6.33)$$

Dimostrazione della (6.31). Definisco

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

Considero il primo termine della (6.31).

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

Il secondo termine della (6.31) è

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

6.3 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 (6.32) l'operatore di ordinamento temporale

$$T[ABC \dots], \tag{6.34}$$

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:

$$T[a(t_3)a^+(t_1)a^+(t_2)] = a^+(t_1)a^+(t_2)a(t_3). \tag{6.35}$$

Un altro esempio:

$$T[a(t_2)a^+(t_1)a^+(t_3)] = -a^+(t_1)a(t_2)a^+(t_3). \tag{6.36}$$

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 rispetto allo 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:

$$N[a_1 a_2^+ a_3 a_4^+] = -a_2^+ a_4^+ a_1 a_3 . \quad (6.37)$$

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:

$$\begin{aligned} a_j |\Phi_0\rangle &\neq 0 \quad \text{ma} \quad a_m |\Phi_0\rangle = 0 \\ a_j^+ |\Phi_0\rangle &= 0 \quad \text{ma} \quad a_m^+ |\Phi_0\rangle \neq 0 . \end{aligned} \quad (6.38)$$

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:

$$N[a_m a_j^+ a_j a_m^+] = a_j a_m^+ a_m a_j^+ . \quad (6.39)$$

Contrazione

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

$$\overline{AB} \equiv T[AB] - N[AB] . \quad (6.40)$$

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:

$$T[AB] = AB . \quad (6.41)$$

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

$$\overline{a_m^+ a_i} = T[a_m^+ a_i] - N[a_m^+ a_i] = a_m^+ a_i - a_m^+ a_i = 0 . \quad (6.42)$$

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:

$$\langle \Phi_0 | \overline{AB} | \Phi_0 \rangle = \langle \Phi_0 | \overline{AB} | \Phi_0 \rangle + \langle \Phi_0 | N[AB] | \Phi_0 \rangle = \overline{AB} \langle \Phi_0 | \Phi_0 \rangle , \quad (6.43)$$

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:

$$\overline{\overline{AB}CD}EF = -\overline{AC} \overline{BF} DE . \quad (6.44)$$

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:

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

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:

$$\begin{aligned} ABCD &= N[ABCD] + N[\overline{AB} \overline{CD}] + N[\overline{AC} \overline{BD}] + N[\overline{AD} \overline{BC}] \\ &+ N[\overline{AB} \overline{CD}] + N[\overline{AC} \overline{BD}] + N[\overline{AD} \overline{BC}] \\ &+ N[\overline{AB} \overline{CD}] + N[\overline{AC} \overline{BD}] + N[\overline{AD} \overline{BC}] \\ &= N[ABCD] + \overline{AB} N[CD] - \overline{AC} N[BD] + \overline{AD} N[BC] \\ &+ \overline{BC} N[AD] - \overline{BD} N[AC] + \overline{CD} N[AB] \\ &+ \overline{ABCD} - \overline{ACBD} + \overline{ADBC} . \end{aligned} \tag{6.45}$$

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.

6.4 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:

$$H = H_0 + e^{-\epsilon|t|} H_1 , \tag{6.46}$$

in cui ϵ è un numero reale positivo. Ovviamente:

$$\lim_{t \rightarrow \pm\infty} H = H_0 , \tag{6.47}$$

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

$$\lim_{t \rightarrow 0} H = H_0 + H_1 . \tag{6.48}$$

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 (6.46) in rappresentazione d'interazione sono espressi come:

$$|\Psi_I(t)\rangle = U_\epsilon(t, t_0)|\Psi_I(t_0)\rangle . \quad (6.49)$$

Il pedice ϵ è stato aggiunto all'operatore di evoluzione temporale U dato che ora, nella sua definizione, eq. (6.19), al posto di $H_1(t)$ bisogna sostituire $e^{-\epsilon|t|}H_1(t)$.

L'equazione (6.33) che esprime l'operatore di evoluzione temporale in termini perturbativi diventa:

$$U_\epsilon(t, t_0) = \sum_{n=0}^{\infty} \left(\frac{-i}{\hbar} \right)^n \frac{1}{n!} \int_{t_0}^t dt_1 \dots \int_{t_0}^t dt_n e^{-\epsilon[|t_1|+|t_2|+\dots]} T[H_1(t_1) \dots H_1(t_n)] , \quad (6.50)$$

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

Riscriviamo l'eq. (6.10) del moto per un sistema descritto dall'hamiltoniana (6.46).

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\Psi_I(t)\rangle = e^{-\epsilon|t|} H_1(t) |\Psi_I(t)\rangle \rightarrow_{t \rightarrow \pm\infty} 0 , \quad (6.51)$$

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

$$|\Psi_I(t)\rangle = U_\epsilon(t, -\infty)|\Phi_0\rangle , \quad (6.52)$$

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 pian piano, fino a $t = 0$ quando è completamente accesa.

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

$$|\Psi_H(t)\rangle_{t \rightarrow 0} = \lim_{t \rightarrow 0} e^{i\frac{H_0 t}{\hbar}} |\Psi_S(t)\rangle = |\Psi_S(0)\rangle \quad (6.53)$$

$$|\Psi_I(t)\rangle_{t \rightarrow 0} = \lim_{t \rightarrow 0} e^{i\frac{H_0 t}{\hbar}} |\Psi_S(t)\rangle = |\Psi_S(0)\rangle \quad (6.54)$$

$$|\Psi_H(0)\rangle = |\Psi_I(0)\rangle = |\Psi_S(0)\rangle , \quad (6.55)$$

da cui:

$$|\Psi_H(0)\rangle = |\Psi_I(0)\rangle = U_\epsilon(0, -\infty)|\Phi_0\rangle . \quad (6.56)$$

L'equazione (6.56) 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,

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{U_\epsilon(0, -\infty)|\Phi_0\rangle}{\langle \Phi_0 | U_\epsilon(0, -\infty) | \Phi_0 \rangle} \equiv \frac{|\Psi_0\rangle}{\langle \Phi_0 | \Psi_0 \rangle} , \quad (6.57)$$

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

$$H \frac{|\Psi_0\rangle}{\langle \Phi_0 | \Psi_0 \rangle} = E_0 \frac{|\Psi_0\rangle}{\langle \Phi_0 | \Psi_0 \rangle} . \quad (6.58)$$

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

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

da cui:

$$E_0 - \mathcal{E}_0 = \frac{\langle \Phi_0 | H_1 | \Psi_0 \rangle}{\langle \Phi_0 | \Psi_0 \rangle} = \frac{\langle \Phi_0 | H_1 U(0, -\infty) | \Phi_0 \rangle}{\langle \Phi_0 | U(0, -\infty) | \Phi_0 \rangle} . \quad (6.59)$$

Il punto essenziale del teorema è che il numeratore e denominatore di (6.57) 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 (6.59) 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 (6.56). In questa equazione U_ϵ viene calcolato utilizzando lo sviluppo dato dalla (6.33) 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 7

Teorema di Goldstone

7.1 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*.

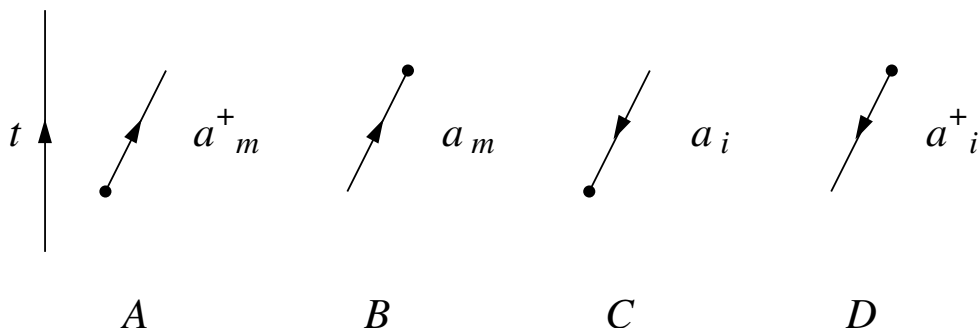


Figura 7.1:

Nella Figura 7.1 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 7.1 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^+ . 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 (D nella Figura) rappresenta la creazione di uno stato buco e gli operatori associati sono a_i^+ 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.

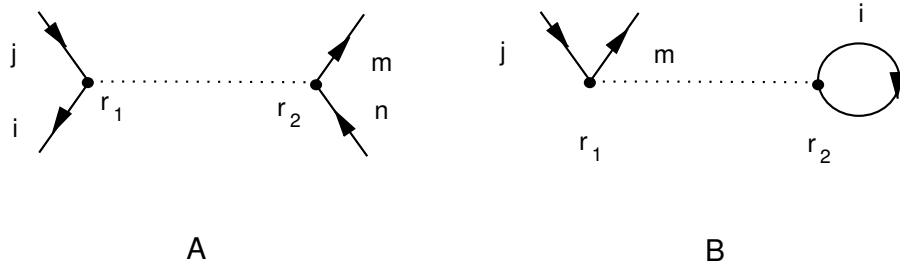


Figura 7.2:

Nella Figura 7.2 presento come esempio due diagrammi di cui scriverò l'espressione.

I diagrammi rappresentano valori di aspettazione del tipo:

$$\langle \Phi_a | V(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) | \Phi_b \rangle \quad (7.1)$$

in cui $|\Phi_a\rangle$ rappresenta lo stato iniziale e $|\Phi_b\rangle$ quello finale.

Considero il diagramma A della Figura 7.2. Lo stato iniziale è composto da uno stato particella n e uno stato buca i :

$$\langle \Phi_a | = \langle \Phi_0 | a_i^+ a_n, \quad |\Phi_a\rangle = a_n^+ a_i |\Phi_0\rangle \quad (7.2)$$

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

$$|\Phi_b\rangle = a_m^+ a_j |\Phi_0\rangle. \quad (7.3)$$

L'espressione del diagramma rappresentato dal grafico A della Figura 7.2 è:

$$\langle \Phi_0 | a_i^+ a_n V a_m^+ a_j | \Phi_0 \rangle. \quad (7.4)$$

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

$$V = \frac{1}{2} \sum_{\nu\nu'\mu\mu'} V_{\nu\mu\nu'\mu'} a_\nu^+ a_\mu^+ a_{\mu'} a_{\nu'}, \quad (7.5)$$

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

La valutazione del termine B della figura 7.2 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:

$$\langle \Phi_0 | a_i^+ a_j V a_i a_m^+ | \Phi_0 \rangle. \quad (7.6)$$

7.2 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:

$$E_0 - \mathcal{E}_0 = \langle \Phi_0 | H_1 \sum_{n=0}^{\infty} \left(\frac{1}{\mathcal{E}_0 - H_0} H_1 \right)^n | \Phi_0 \rangle_c, \quad (7.7)$$

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. (7.7) per i primi termini di n

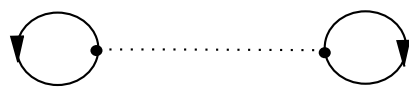
$$\begin{aligned} E_0 - \mathcal{E}_0 &= \langle \Phi_0 | H_1 | \Phi_0 \rangle \\ &+ \langle \Phi_0 | H_1 \frac{1}{\mathcal{E}_0 - H_0} H_1 | \Phi_0 \rangle_c \\ &+ \langle \Phi_0 | H_1 \frac{1}{\mathcal{E}_0 - H_0} H_1 \frac{1}{\mathcal{E}_0 - H_0} H_1 | \Phi_0 \rangle_c \\ &+ \dots \end{aligned} \quad (7.8)$$

Alcuni dei diagrammi prodotti dallo sviluppo sono presentati nella figura 7.3. Il diagramma A è contenuto nel primo termine dell'eq. (7.8). 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 7.4).

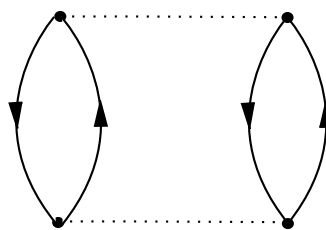
Ovviamente il diagramma B della figura 7.3 è uno dei diagrammi del secondo termine dell'eq. (7.8) dato che contiene due linee di interazione H_1 . Anche qui bisogna aggiungere il termine di scambio.

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 ($(\mathcal{E}_0 - H_0)^{-1}$ indica il propagatore) e poi viene de-eccitato dall'azione di un altro termine H_1 .

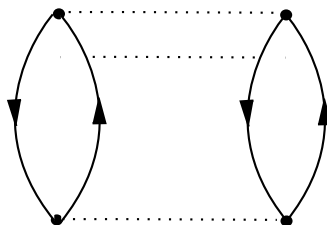
L'espressione tradizionale dello sviluppo perturbativo, può essere ottenuta inserendo una completezza di autostati di H_0 , $I = \sum_{n \neq 0} |\Phi_n\rangle \langle \Phi_n|$, (ho indicato con I l'operatore identità):



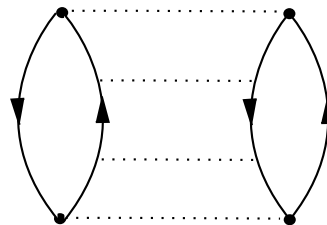
A



B



C



D

Figura 7.3:

$$E_0 - \mathcal{E}_0 = \langle \Phi_0 | H_1 | \Phi_0 \rangle + \sum_{n \neq 0} \frac{\langle \Phi_0 | H_1 | \Phi_n \rangle \langle \Phi_n | H_1 | \Phi_0 \rangle}{\mathcal{E}_0 - \mathcal{E}_n} + \dots \quad (7.9)$$

Nel seguito darò l'indicazione di come si procede nella prova dell'eq. (7.7) partendo dall'espressione data dal teorema di Gell-Mann e Low. L'eq. (6.59) può essere riscritta come:

$$E_0 - \mathcal{E}_0 = \frac{\langle \Phi_0 | H_1 | \Psi_0 \rangle}{\langle \Phi_0 | \Psi_0 \rangle} = \frac{\langle \Phi_0 | H_1 U(0, -\infty) | \Phi_0 \rangle}{\langle \Phi_0 | U(0, -\infty) | \Phi_0 \rangle} . \quad (7.10)$$

Utilizzando l'espressione (6.33) dell'operatore di evoluzione temporale, si ottiene per il numeratore:

$$\begin{aligned} \langle \Phi_0 | H_1 U(0, -\infty) | \Phi_0 \rangle &= \sum_{\nu=0} \left(\frac{-i}{\hbar} \right)^\nu \frac{1}{\nu!} \int_{-\infty}^0 dt_1 \dots \int_{-\infty}^0 dt_\nu \\ &\quad \langle \Phi_0 | T[H_1, H_1(t_1) \dots, H_1(t_\nu)] | \Phi_0 \rangle , \end{aligned} \quad (7.11)$$

dove abbiamo usato il $\lim \varepsilon \rightarrow 0$ di eq. (6.50). 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 $\nu = 1$:

$$\begin{aligned} \langle \Phi_0 | H_1(0) H_1(t_1) | \Phi_0 \rangle &\sim \\ \langle \Phi_0 | V_{\mu\nu\mu'\nu'} a_\mu^+(0) a_\nu^+(0) a_{\nu'}(0) a_{\mu'}(0) V_{\eta\xi\eta'\xi'} a_\eta^+(t_1) a_\xi^+(t_1) a_{\xi'}(t_1) a_{\eta'}(t_1) | \Phi_0 \rangle , \end{aligned} \quad (7.12)$$

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 $|\Phi_0\rangle\langle\Phi_0| = I$:

$$\langle \Phi_0 | V_{\mu\nu\mu'\nu'} a_\mu^+ a_\nu^+ a_{\nu'} a_{\mu'} | \Phi_0 \rangle_{t=0} \langle \Phi_0 | V_{\eta\xi\eta'\xi'} a_\eta^+ a_\xi^+ a_{\xi'} a_{\eta'} | \Phi_0 \rangle_{t=t_1} . \quad (7.13)$$

Le contrazioni non nulle in questi due termini sono:

$$\overbrace{a_\mu^+(t) a_\nu^+(t) a_{\nu'}(t) a_{\mu'}(t)} \quad , \quad (7.14)$$

e

$$\overbrace{a_\mu^+(t) a_\nu^+(t) a_{\nu'}(t) a_{\mu'}(t)} \quad . \quad (7.15)$$

Il primo di questi termini è raffigurato dal diagramma A della figura 7.4 e il secondo dal diagramma B della stessa figura.

Il termine di eq. (7.13) produce quattro diagrammi, ognuno di questi ottenuto accoppiando due dei diagrammi di figura 7.4: 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:

$$\langle \Phi_0 | V_{\mu\nu\mu'\nu'} a_\mu^+(0) a_\nu^+(0) a_{\nu'}(0) a_{\mu'}(0) \overbrace{V_{\eta\xi\eta'\xi'} a_\eta^+(t) a_\xi^+(t) a_{\xi'}(t) a_{\eta'}(t)} | \Phi_0 \rangle . \quad (7.16)$$

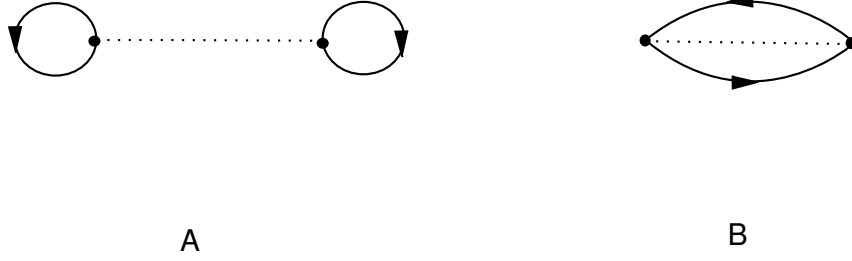


Figura 7.4:

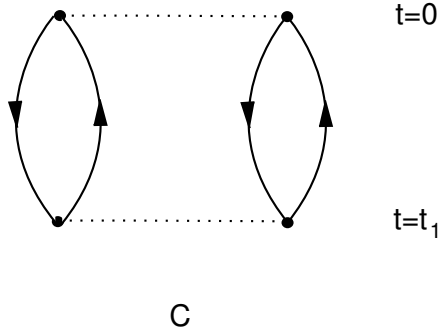


Figura 7.5:

Il diagramma che rappresenta questo termine è mostrato in figura 7.5.

Il termine con $\nu = 1$, eq. (7.12), produce quindi diagrammi non connessi, come il diagramma A in Figura 7.6, 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. (7.7).

Considero un termine dell'eq. (7.11) e ipotizzo che sia composto da due parti non connesse, come ad esempio il diagramma mostrato nella figura 7.7:

Il contributo di un diagramma di questo tipo è:

$$\begin{aligned}
 \langle \Phi_0 | H_1 U(0, -\infty) | \Phi_0 \rangle_\nu &= \\
 \left(\frac{-i}{\hbar} \right)^\nu \frac{1}{\nu!} \int_{-\infty}^0 dt_1 \dots \int_{-\infty}^0 dt_n &\langle \Phi_0 | T[H_1(0) \dots H_1(t_n)] | \Phi_0 \rangle_c \\
 \int_{-\infty}^0 dt_{n+1} \dots \int_{-\infty}^0 dt_{n+m} &\langle \Phi_0 | T[H_1(t_{n+1}) \dots H_1(t_{n+m})] | \Phi_0 \rangle_c . \quad (7.17)
 \end{aligned}$$

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

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

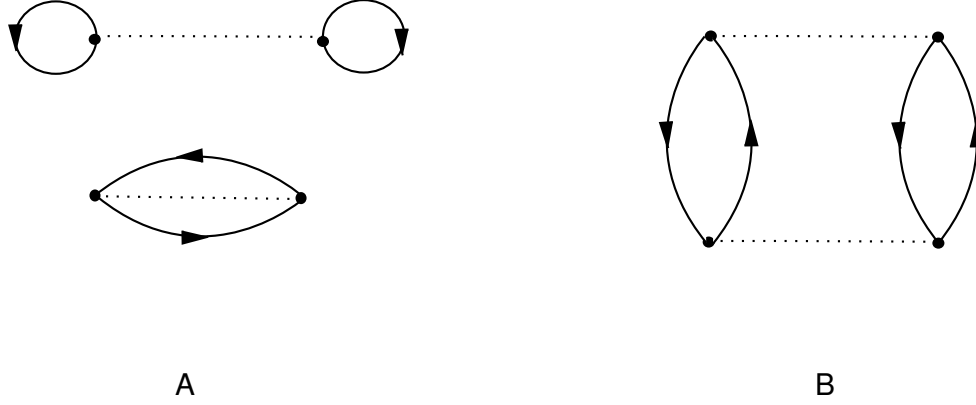


Figura 7.6:

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, poiché l'operatore di ordinamento temporale riordina i vari termini. Il numero delle permutazioni che non generano nessun nuovo diagramma è $n! m!$.

Il contributo totale dei diagrammi del tipo di quello di Figura 7.7 all'eq. (7.11) è dato da :

$$\sum_n \sum_m \left(\frac{-i}{\hbar} \right)^{n+m} \frac{\nu!}{n!m!} \frac{1}{\nu!} \int_{-\infty}^0 dt_1 \dots \int_{-\infty}^0 dt_n \langle \Phi_0 | T[H_1, H_1(t_1) \dots H_n(t_n)] | \Phi_0 \rangle_c \int_{-\infty}^0 dt_{n+1} \dots \int_{-\infty}^0 dt_{n+m} \langle \Phi_0 | T[H_1(t_{n+1}) \dots H_1(t_{n+m})] | \Phi_0 \rangle_c \quad (7.18)$$

Il secondo termine è presente nel denominatore di eq. (7.10). 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. (7.10). L'equazione (7.10) può essere riscritta come

$$\begin{aligned} E_0 - \mathcal{E}_0 &= \left[\sum_{\nu=0}^{\infty} \left(\frac{-i}{\hbar} \right)^{\nu} \frac{1}{\nu!} \int_{-\infty}^0 dt_1 \dots \int_{-\infty}^0 dt_{\nu} \langle \Phi_0 | T[H_1(0), H_1(t_1) \dots, H_1(t_{\nu})] | \Phi_0 \rangle \right]_c \\ &\quad \left[\sum_{\nu=0}^{\infty} \left(\frac{-i}{\hbar} \right)^{\nu} \frac{1}{\nu!} \int_{-\infty}^0 dt_1 \dots \int_{-\infty}^0 dt_{\nu} \langle \Phi_0 | T[H_1(t_1) \dots, H_1(t_{\nu})] | \Phi_0 \rangle \right] / \langle \Phi_0 | U(0, -\infty) | \Phi_0 \rangle \\ &= \left[\sum_{\nu=0}^{\infty} \left(\frac{-i}{\hbar} \right)^{\nu} \frac{1}{\nu!} \int_{-\infty}^0 dt_1 \dots \int_{-\infty}^0 dt_{\nu} \langle \Phi_0 | T[H_1, H_1(t_1) \dots, H_1(t_{\nu})] | \Phi_0 \rangle \right]_c, \end{aligned}$$

dove ho utilizzato il fatto che ν ed i tempi t sono indici muti perché vengono sommati ed integrati. Tutti i diagrammi non collegati con $H_1(0)$ da una contrazione 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.

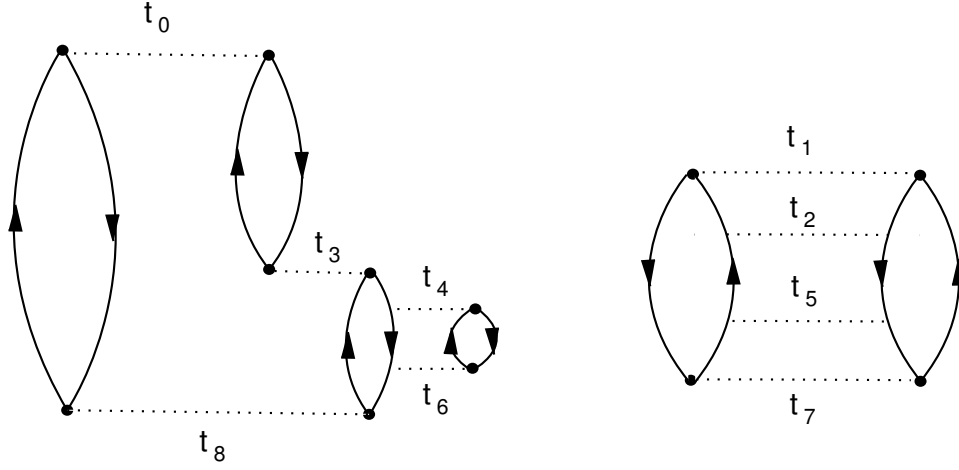


Figura 7.7:

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

$$H_1(t) = e^{i\frac{H_0 t}{\hbar}} H_1 e^{-i\frac{H_0 t}{\hbar}}. \quad (7.19)$$

Il termine di ordine n può essere scritto come:

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

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:

$$\begin{aligned} x_1 &= t_1, & x_2 &= t_2 - t_1, & x_3 &= t_3 - t_2, & \dots, & x_n &= t_n - t_{n-1} \\ t_1 &= x_1, & t_2 &= x_2 + x_1, & t_3 &= x_3 + x_2 + x_1, & \dots, & t_n &= \sum_{k=1}^n x_k \end{aligned}$$

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

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

Considero il termine a destra dell'equazione precedente,

$$e^{-i\frac{H_0 t_n}{\hbar}} | \Phi_0 \rangle = e^{-i\frac{\mathcal{E}_0}{\hbar} t_n} | \Phi_0 \rangle = e^{-i\frac{\mathcal{E}_0}{\hbar} (x_1 + \dots + x_n)} | \Phi_0 \rangle \quad (7.20)$$

che inserito nell'integrale permette di scrivere:

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

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

$$\int_{-\infty}^0 dx_1 e^{i\frac{\hbar}{\hbar}(H_0 - \mathcal{E}_0 - i n \epsilon \hbar)x_1} = \frac{\hbar}{-i} \frac{1}{[\mathcal{E}_0 - H_0 + i n \epsilon \hbar]} \quad (7.21)$$

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

$$[E - \mathcal{E}_0]_n = \langle \Phi_0 | H_1 \frac{1}{\mathcal{E}_0 - H_0 + i n \epsilon \hbar} H_1 \frac{1}{\mathcal{E}_0 - H_0 + i \epsilon (n-1) \hbar} \dots H_1 \frac{1}{\mathcal{E}_0 - H_0 + i \epsilon \hbar} H_1 | \Phi_0 \rangle_c \quad (7.22)$$

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 $\mathcal{E}_0 - H_0$ è sempre diverso da zero.

Capitolo 8

Teoria di Brueckner

8.1 Introduzione

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

$$E_0 - \mathcal{E}_0 = \langle \Phi_0 | H_1 \sum_n \left(\frac{1}{\mathcal{E}_0 - H_0} H_1 \right)^n | \Phi_0 \rangle_c, \quad (8.1)$$

dove E_0 è l'energia del sistema interagente, \mathcal{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 (8.1) 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 coulombiana presenta una divergenza per distanze relative nulle. Il problema legato alla divergenza, o forte repulsione, per piccole distanze, è schematicamente illustrato nella figura 8.1 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 (8.1) una interazione effettiva che si comporti bene a piccole distanze, in modo da essere perturbativa. Questo implica la

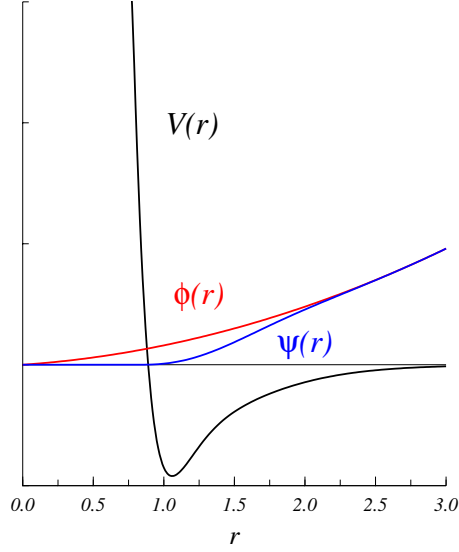


Figura 8.1: Potenziale microscopico tra due fermioni e funzioni d'onda relative. Con ψ indichiamo quella dei due fermioni interagenti e con ϕ quella dei due fermioni non interagenti.

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

$$\mathcal{G}|\Phi_0\rangle = V|\Psi_0\rangle, \quad (8.2)$$

dove

$$H_0|\Phi_0\rangle = \mathcal{E}_0|\Phi_0\rangle, \quad (8.3)$$

e

$$H|\Psi_0\rangle = (H_0 + H_1)|\Psi_0\rangle = (H_0 + V)|\Psi_0\rangle = E_0|\Psi_0\rangle. \quad (8.4)$$

8.2 L'equazione di Bethe-Goldstone

Otteniamo l'equazione di Bethe-Goldstone partendo dalla definizione (8.2). Utilizziamo le seguenti definizioni

$$H_0|\Phi_n\rangle = \mathcal{E}_n|\Phi_n\rangle, \quad (8.5)$$

$$H|\Psi_n\rangle = (H_0 + H_1)|\Psi_n\rangle = E_n|\Psi_n\rangle. \quad (8.6)$$

Dato che gli autostati della (8.5) formano una base completa, si può, a meno di una costante di normalizzazione globale, sviluppare la $|\Psi_0\rangle$ su questa base

$$|\Psi_0\rangle \simeq |\Phi_0\rangle + \sum_{n \neq 0} a_n |\Phi_n\rangle. \quad (8.7)$$

La (8.6) per lo stato fondamentale può essere riscritta come

$$(H_0 + H_1) \left(|\Phi_0\rangle + \sum_{n \neq 0} a_n |\Phi_n\rangle \right) = E_0 \left(|\Phi_0\rangle + \sum_{n \neq 0} a_n |\Phi_n\rangle \right) , \quad (8.8)$$

$$(H_0 - E_0) \left(|\Phi_0\rangle + \sum_{n \neq 0} a_n |\Phi_n\rangle \right) + H_1 |\Psi_0\rangle = 0 . \quad (8.9)$$

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

$$\begin{aligned} \langle \Phi_0 | (H_0 - E_0) \left(|\Phi_0\rangle + \sum_{n \neq 0} a_n |\Phi_n\rangle \right) + \langle \Phi_0 | H_1 |\Psi_0\rangle &= 0 , \\ \mathcal{E}_0 - E_0 + \langle \Phi_0 | H_1 |\Psi_0\rangle &= 0 . \end{aligned} \quad (8.10)$$

Moltiplicando per $\langle \Phi_n |$ la (8.9), con $n > 0$, si ha

$$\langle \Phi_n | (H_0 - E_0) \left(|\Phi_0\rangle + \sum_{n' \neq 0} a_{n'} |\Phi_{n'}\rangle \right) + \langle \Phi_n | H_1 |\Psi_0\rangle = 0 , \quad (8.11)$$

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

$$(\mathcal{E}_n - E_0) a_n + \langle \Phi_n | H_1 |\Psi_0\rangle = 0 . \quad (8.12)$$

Utilizzando l'espressione degli a_n estratta dall'equazione precedente, ed inserendola nella (8.7) otteniamo

$$\begin{aligned} |\Psi_0\rangle &\simeq |\Phi_0\rangle + \sum_{n \neq 0} \frac{1}{E_0 - \mathcal{E}_n} |\Phi_n\rangle \langle \Phi_n | H_1 |\Psi_0\rangle \\ &= |\Phi_0\rangle + Q \frac{1}{E_0 - H_0} H_1 |\Psi_0\rangle , \end{aligned} \quad (8.13)$$

dove ho definito l'operatore Q come

$$Q = \sum_{n \neq 0} |\Phi_n\rangle \langle \Phi_n| . \quad (8.14)$$

Moltiplicando a sinistra per H_1

$$H_1 |\Psi_0\rangle = H_1 |\Phi_0\rangle + H_1 \frac{Q}{E_0 - H_0} H_1 |\Psi_0\rangle , \quad (8.15)$$

e considerando la definizione (8.2) dell'operatore \mathcal{G} , $H_1 |\Psi_0\rangle = \mathcal{G} |\Phi_0\rangle$

$$\mathcal{G} |\Phi_0\rangle = H_1 |\Phi_0\rangle + H_1 \frac{Q}{E_0 - H_0} \mathcal{G} |\Phi_0\rangle = \left(H_1 + H_1 \frac{Q}{E_0 - H_0} \mathcal{G} \right) |\Phi_0\rangle . \quad (8.16)$$

Nel prossimo paragrafo mostrerò come si può ottenere l'equazione di Bethe-Goldstone in maniera diagrammatica, inserendo infiniti termini a scala dell'interazione nelle linee di particella.

8.3 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.

$$H = \sum_i t_i + \sum_{i < j} v_{ij} = \sum_i (t_i + u_i) + \sum_{i < j} v_{ij} - \sum_i u_i , \quad (8.17)$$

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

$$H_0|\Phi_0\rangle = (T + U)|\Phi_0\rangle = \sum_i (t_i + u_i)|\Phi_0\rangle = \sum_i h_i|\Phi_0\rangle , \quad (8.18)$$

dove Φ_0 è il determinante di Slater

$$\Phi_0(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_A) = \frac{1}{\sqrt{A!}} \det |\phi_1(\mathbf{r}_1)\phi_2(\mathbf{r}_2) \dots \phi_A(\mathbf{r}_A)| , \quad (8.19)$$

e le funzioni di singola particella sono definite come

$$h_i|\phi_i\rangle = \epsilon_i|\phi_i\rangle , \quad (8.20)$$

e

$$\mathcal{E}_0 = \sum_i \epsilon_i . \quad (8.21)$$

Nella rappresentazione dei numeri di occupazione si ha che

$$H_0 = \sum_\nu (\langle \nu|t|\nu\rangle + \langle \nu|u|\nu\rangle) a_\nu^\dagger a_\nu , \quad (8.22)$$

$$H_1 = \frac{1}{2} \sum_{\nu\nu'\mu\mu'} \langle \nu\mu|v|\nu'\mu'\rangle a_\nu^\dagger a_\mu^\dagger a_{\mu'} a_{\nu'} - \sum_\nu \langle \nu|u|\nu\rangle a_\nu^\dagger a_\nu , \quad (8.23)$$

Per definizione abbiamo che

$$\mathcal{E}_0 = \langle \Phi_0|H_0|\Phi_0\rangle = \langle \Phi_0|T|\Phi_0\rangle + \langle \Phi_0|U|\Phi_0\rangle , \quad (8.24)$$

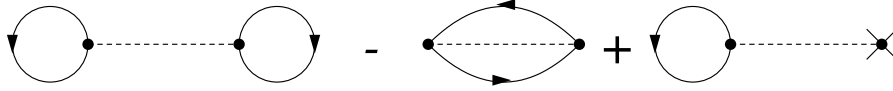


Figura 8.2: Diagrammi corrispondenti al termine (8.25).

Il primo termine dello sviluppo (8.1) è $n = 0$

$$\begin{aligned} (E_0 - \mathcal{E}_0)_{(n=0)} &= \langle \Phi_0|H_1|\Phi_0\rangle = \langle \Phi_0|V - U|\Phi_0\rangle \\ &= \frac{1}{2} \sum_{\nu\nu'\mu\mu'} \langle \nu\mu|v|\nu'\mu'\rangle \langle \Phi_0|a_\nu^\dagger a_\mu^\dagger a_{\mu'} a_{\nu'}|\Phi_0\rangle - \sum_\nu \langle \nu|u|\nu\rangle \langle \Phi_0|a_\nu^\dagger a_\nu|\Phi_0\rangle \\ &= \frac{1}{2} \sum_{ij} (\langle ij|v|ij\rangle - \langle ij|v|ji\rangle) - \sum_i \langle i|u|i\rangle . \end{aligned} \quad (8.25)$$

I diagrammi corrispondenti sono presentati nella figura 8.2. 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 $n = 1$.

$$\begin{aligned}
 (E_0 - \mathcal{E}_0)_{(n=1)} &= \langle \Phi_0 | H_1 (\mathcal{E}_0 - H_0)^{-1} H_1 | \Phi_0 \rangle_c \\
 &= \langle \Phi_0 | V (\mathcal{E}_0 - H_0)^{-1} V | \Phi_0 \rangle_c - \langle \Phi_0 | U (\mathcal{E}_0 - H_0)^{-1} V | \Phi_0 \rangle_c \\
 &\quad - \langle \Phi_0 | V (\mathcal{E}_0 - H_0)^{-1} U | \Phi_0 \rangle_c + \langle \Phi_0 | U (\mathcal{E}_0 - H_0)^{-1} U | \Phi_0 \rangle_c .
 \end{aligned} \tag{8.26}$$

Consideriamo il primo termine

$$\begin{aligned}
 &\langle \Phi_0 | V (\mathcal{E}_0 - H_0)^{-1} V | \Phi_0 \rangle_c \\
 &= \frac{1}{4} \langle \Phi_0 | \sum_{\nu\nu'\mu\mu'} \langle \nu\mu | v | \nu'\mu' \rangle a_{\nu}^+ a_{\mu}^+ a_{\mu'} a_{\nu'} (\mathcal{E}_0 - H_0)^{-1} \sum_{\alpha\beta\alpha'\beta'} \langle \alpha\beta | v | \alpha'\beta' \rangle a_{\alpha}^+ a_{\beta}^+ a_{\beta'} a_{\alpha'} | \Phi_0 \rangle_c .
 \end{aligned} \tag{8.27}$$

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

$$|\Phi_n\rangle = a_m^+ a_p^+ a_j a_i |\Phi_0\rangle ; \quad \mathcal{E}_0 + \epsilon_m + \epsilon_n - \epsilon_i - \epsilon_j . \tag{8.28}$$

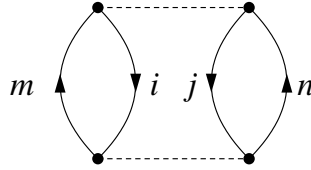


Figura 8.3: Diagrammi corrispondenti al termine (8.29).

Dato che $|\Phi_n\rangle$ è autostato di H_0 , il denominatore della (8.29) 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 8.3. Il contributo di questo diagramma è

$$\begin{aligned}
 \langle \Phi_0 | V (\mathcal{E}_0 - H_0)^{-1} V | \Phi_0 \rangle_c &= \frac{1}{4} \sum_{ijmn} (\langle ij | v | mn \rangle (\mathcal{E}_0 - (\mathcal{E}_0 + \epsilon_m + \epsilon_n - \epsilon_i - \epsilon_j))^{-1} \langle mn | v | ij \rangle) \\
 &= \sum_{ijmn} (\langle ij | v | mn \rangle (\epsilon_i + \epsilon_j - \epsilon_m - \epsilon_n)^{-1} \langle mn | v | ij \rangle) .
 \end{aligned} \tag{8.29}$$

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

$$\langle \Phi_0 | V (\mathcal{E}_0 - H_0)^{-1} U | \Phi_0 \rangle_c = \sum_{ijm} (\langle ij | v | mj \rangle (\epsilon_i - \epsilon_m)^{-1} \langle m | u | i \rangle) . \tag{8.30}$$

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

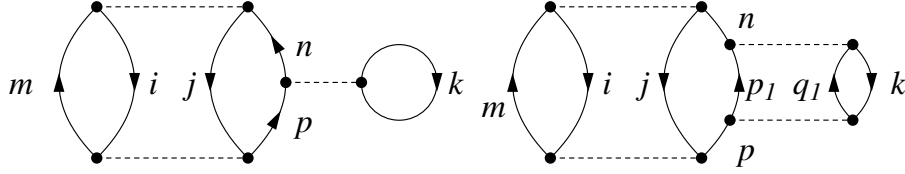


Figura 8.4: Inserimento di interazioni nella linea di particella.

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 8.4, 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

$$\begin{aligned} & \langle \Phi_0 | V(\mathcal{E}_0 - H_0)^{-1} V(\mathcal{E}_0 - H_0)^{-1} V | \Phi_0 \rangle_c \\ &= \sum_{ijmp} \langle ij | v | mp \rangle (\epsilon_i + \epsilon_j - \epsilon_m - \epsilon_p)^{-1} \sum_k \langle pk | v | nk \rangle (\epsilon_i + \epsilon_j - \epsilon_m - \epsilon_n)^{-1} \langle mn | v | ij \rangle . \end{aligned} \quad (8.31)$$

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

$$\begin{aligned} & \langle \Phi_0 | V(\mathcal{E}_0 - H_0)^{-1} V(\mathcal{E}_0 - H_0)^{-1} V(\mathcal{E}_0 - H_0)^{-1} V | \Phi_0 \rangle_c \\ &= \sum_{ijmp} \langle ij | v | mp \rangle (\epsilon_i + \epsilon_j - \epsilon_m - \epsilon_p)^{-1} \\ & \quad \sum_k \left[\sum_{p_1 q_1} \langle pk | v | p_1 q_1 \rangle (\epsilon_i + \epsilon_j + \epsilon_k - \epsilon_m - \epsilon_{p_1} - \epsilon_{q_1})^{-1} \langle p_1 q_1 | v | nk \rangle \right] \\ & \quad (\epsilon_i + \epsilon_j - \epsilon_m - \epsilon_n)^{-1} \langle mn | v | ij \rangle . \end{aligned} \quad (8.32)$$

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 (8.32) 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 una parte, costante, che rappresenta le differenze tra le energie delle parti del diagramma non modificate. Definiamo

$$W = \epsilon_i + \epsilon_j + \epsilon_k - \epsilon_m . \quad (8.33)$$

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

$$1 \text{ linea} \quad \langle pk | v | nk \rangle \quad (8.34)$$

$$2 \text{ linee} \quad \sum_{p' q'} \langle pk | v | p_1 q_1 \rangle (W - \epsilon_{p_1} - \epsilon_{q_1})^{-1} \langle p_1 q_1 | v | nk \rangle \quad (8.35)$$

$$3 \text{ linee} \quad \sum_{p_1 q_1 p_2 q_2} \langle pk | v | p_1 q_1 \rangle (W - \epsilon_{p_1} - \epsilon_{q_1})^{-1} \langle p_1 q_1 | v | p_2 q_2 \rangle (W - \epsilon_{p_2} - \epsilon_{q_2})^{-1} \langle p_2 q_2 | v | nk \rangle \quad (8.36)$$

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

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

$$Q|\alpha\beta\rangle = |\alpha\beta\rangle \text{ (se } \epsilon_\alpha, \epsilon_\beta > \epsilon_F) \quad (8.37)$$

$$Q|\alpha\beta\rangle = 0 \text{ (se } \epsilon_\alpha, \epsilon_\beta < \epsilon_F) , \quad (8.38)$$

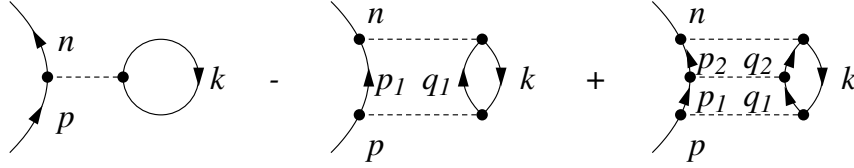


Figura 8.5: Inserimento di interazioni nella linea di particella.

e un operatore

$$\mathcal{W}|pq\rangle = (W - \epsilon_p - \epsilon_q)|pq\rangle \quad , \quad (8.39)$$

Quindi

$$\begin{aligned} \langle pk|\mathcal{G}|nk\rangle &= \langle pk|v|nk\rangle \\ &+ \sum_{p_1 q_1} \langle pk|v|p_1 q_1\rangle (W - \epsilon_{p_1} - \epsilon_{q_1})^{-1} \langle p_1 q_1|v|nk\rangle \\ &+ \sum_{p_1 q_1 p_2 q_2} \langle pk|v|p_2 q_2\rangle (W - \epsilon_{p_2} - \epsilon_{q_2})^{-1} \langle p_2 q_2|v|p_1 q_1\rangle (W - \epsilon_{p_1} - \epsilon_{q_1})^{-1} \langle p_1 q_1|v|nk\rangle \\ &+ \dots \\ &= \langle pk|v + v \frac{Q}{\mathcal{W}} v + v \frac{Q}{\mathcal{W}} v \frac{Q}{\mathcal{W}} v + \dots |nk\rangle \\ &= \langle pk|v + v \frac{Q}{\mathcal{W}} \mathcal{G}|nk\rangle \quad . \end{aligned} \quad (8.40)$$

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

$$\mathcal{G} = v + v \frac{Q}{\mathcal{W}} \mathcal{G} \quad . \quad (8.41)$$

L'idea è quella di utilizzare nello sviluppo di Goldstone (8.1) l'interazione \mathcal{G} al posto di V . A questo scopo bisogna evitare la possibilità di doppio conteggio. Ad esempio nel diagramma di figura 8.6 le due linee superiori rappresentano un un doppio conteggio.

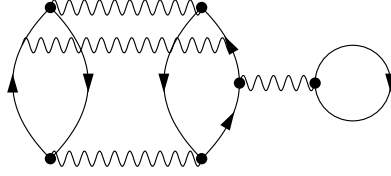


Figura 8.6: Diagramma che presenta un doppio conteggio.

8.4 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

$$\lim_{r \rightarrow \infty} \psi_{k_a}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}_a \cdot \mathbf{r}} + f_{k_a}(\Omega) \frac{e^{ik_a r}}{r} . \quad (8.42)$$

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

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f_{k_a}(\Omega)|^2 , \quad (8.43)$$

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

$$\langle \phi_b | V | \psi_a \rangle = -\frac{2\pi\hbar^2}{m} f_a(\Omega) , \quad (8.44)$$

dove ho semplificato la scrittura indicando $a = k_a$ e analogamente per b . L'equazione (8.44) 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

$$\frac{\hbar^2}{2m} [\nabla^2 + k^2] G^0(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') , \quad (8.45)$$

che implica

$$G^0(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \frac{e^{ik|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} , \quad (8.46)$$

dove l'energia della particella libera è

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} . \quad (8.47)$$

La validità dell'espressione (8.46) può essere verificata per sostituzione ricordando che

$$\nabla^2 \frac{1}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} = -4\pi\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$$

La soluzione dell'equazione di Schrödinger con potenziale è

$$\psi(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} + \int d^3r' G^0(\mathbf{r}, \mathbf{r}') V(\mathbf{r}') \psi(\mathbf{r}') , \quad (8.48)$$

infatti inserendola nell'equazione

$$\frac{\hbar^2}{2m} [\nabla^2 + k^2] \psi(\mathbf{r}) = V(\mathbf{r}) \psi(\mathbf{r}) , \quad (8.49)$$

abbiamo

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

Definiamo un operatore \mathcal{T} tale che

$$\langle \phi_b | \mathcal{T} | \phi_a \rangle = \langle \phi_b | V | \psi_a \rangle . \quad (8.50)$$

In termini operatoriali abbiamo che la (8.45) può essere riscritta come

$$(E - H_0) G^0 = 1 ; \quad G^0 = (E - H_0)^{-1} , \quad (8.51)$$

e la (8.48)

$$|\psi_a\rangle = |\phi_a\rangle + G^0 V |\psi_a\rangle = |\phi_a\rangle + \frac{1}{E - H_0 + i\eta} V |\psi_a\rangle , \quad (8.52)$$

dove è stato inserito il termine $i\eta$ per evitare divergenze. Moltiplicando a sinistra per V e considerando la definizione di \mathcal{T} (8.50)

$$\begin{aligned} V |\psi_a\rangle &= V |\phi_a\rangle + V \frac{1}{E - H_0 + i\eta} V |\psi_a\rangle \\ \mathcal{T} |\phi_a\rangle &= \left(V + V \frac{1}{E - H_0 + i\eta} \mathcal{T} \right) |\phi_a\rangle , \end{aligned} \quad (8.53)$$

che è l'equazione di Lipmann-Schwinger.

L'analogia con l'equazione di Bethe-Goldstone (8.16) 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 necessaria 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 (8.33) 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.

8.5 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 [Kra88]. 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:

$$\rho = \frac{A}{\frac{4}{3}\pi R^3} = \frac{A}{\frac{4}{3}\pi r_0^3 A} = \frac{3}{4\pi r_0^3} = 0.17 \pm 0.02 \text{ fm}^{-3} . \quad (8.54)$$

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 [Kra88] 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:

$$B(A, Z) = a_v A + a_s A^{\frac{2}{3}} + a_c \frac{Z^2}{A^{\frac{1}{3}}} + a_i \frac{(N - Z)^2}{A} + \delta(A) . \quad (8.55)$$

Come accennato, 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: 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:

$$\frac{B(A, Z)}{A} = a_v + a_s A^{-\frac{1}{3}} + \frac{\delta(A)}{A} , \quad (8.56)$$

e, trascurando l'ultimo termine, quello di appaiamento, 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.

La trattazione di un sistema ad invarianza traslazionale in approssimazione di campo medio è stata fatta nel paragrafo 2.3. L'equazione (2.54) esprime la densità del sistema in funzione dell'impulso di Fermi.

$$\rho(\mathbf{r}) = \frac{2}{3\pi^2} k_F^3 . \quad (8.57)$$

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'equazione (2.57) fornisce l'energia cinetica per particella del sistema

$$\frac{T}{A} = \frac{3}{5} \epsilon_F , \quad (8.58)$$

dove l'energia di Fermi è data da

$$\epsilon_F = \frac{\hbar^2}{2m} k_F^2 . \quad (8.59)$$

Mostro come si applica la teoria di Brueckner a questo sistema. Definiamo le coordinate relative per due particelle p e q che interagiscono

$$\mathbf{R} = \frac{1}{2}(\mathbf{r}_p + \mathbf{r}_q) \quad ; \quad \mathbf{r} = \mathbf{r}_p - \mathbf{r}_q \quad (8.60)$$

$$\mathbf{K}_{pq} = \mathbf{k}_p + \mathbf{k}_q \quad ; \quad \mathbf{k}_{pq} = \mathbf{k}_p - \mathbf{k}_q . \quad (8.61)$$

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

$$\Phi_{pq}(\mathbf{r}_p, \mathbf{r}_q) = \frac{1}{\mathcal{V}} e^{i\mathbf{k}_p \cdot \mathbf{r}_p} e^{i\mathbf{k}_q \cdot \mathbf{r}_q} = \frac{1}{\mathcal{V}} e^{i\mathbf{K}_{pq} \cdot \mathbf{R}} e^{i\mathbf{k}_{pq} \cdot \mathbf{r}} = \frac{1}{\mathcal{V}} e^{i\mathbf{K}_{pq} \cdot \mathbf{R}} \phi_{pq}(\mathbf{r}) , \quad (8.62)$$

dove ho trascurato i termini di spin e isospin.

Gli operatori Q e \mathcal{W} definiti precedentemente agiscono su questa funzione d'onda. L'azione di Q sulla funzione d'onda

$$Q|\Phi_{pq}\rangle = |\Phi_{pq}\rangle \quad (8.63)$$

è diversa da zero solo se sia $|\mathbf{k}_p|$ che $|\mathbf{k}_q|$ sono maggiori di k_F , e

$$\mathcal{W}|\Phi_{pq}\rangle = [W - \epsilon(\mathbf{k}_p) - \epsilon(\mathbf{k}_q)] |\Phi_{pq}\rangle = \epsilon(\mathbf{k}_p, \mathbf{k}_q) |\Phi_{pq}\rangle . \quad (8.64)$$

Consideriamo la funzione d'onda delle due particelle che interagiscono

$$\Psi_{pq}(\mathbf{r}_p, \mathbf{r}_q) = \frac{1}{\mathcal{V}} e^{i\mathbf{K}_{pq} \cdot \mathbf{R}} \psi_{pq}(\mathbf{r}) . \quad (8.65)$$

Data la definizione di (8.2) posso scrivere

$$\begin{aligned} \langle \Phi_{pq} | \mathcal{G} | \Phi_{rs} \rangle &= \int d^3 r_p d^3 r_q \Phi_{pq}(\mathbf{r}_p, \mathbf{r}_q) V(\mathbf{r}) \Psi_{rs}(\mathbf{r}_p, \mathbf{r}_q) \\ &= \frac{1}{(2\pi)^3} \delta(\mathbf{K}_{pq} - \mathbf{K}_{rs}) \int d^3 r e^{i\mathbf{k}_{pq} \cdot \mathbf{r}} V(\mathbf{r}) \psi_{rs}(\mathbf{r}) \equiv \langle \phi_{pq} | \mathcal{G} | \phi_{rs} \rangle . \end{aligned} \quad (8.66)$$

La parte relativa alla coordinata del centro di massa del sistema può essere fattorizzata, quindi, considerando la (8.13), otteniamo

$$\psi_{pq}(\mathbf{r}) = \phi_{pq}(\mathbf{r}) + \int d^3r' \mathcal{K}_{pq}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') V(r') \psi_{pq}(\mathbf{r}') , \quad (8.67)$$

con

$$\mathcal{K}_{pq}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \frac{1}{(2\pi)^3} \int d^3k \frac{Q(\mathbf{K}_{pq}, \mathbf{k})}{e(\mathbf{K}_{pq}, \mathbf{k})} e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}')} . \quad (8.68)$$

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 (8.68).
3. Inserimento del kernel (8.68) nella (8.67).
4. Inserimento della (8.67) nell'elemento di matrice (8.66).

8.6 Considerazioni finali

1. Nella diffusione nel vuoto il denominatore dell'equazione di Lipmann-Schwinger (8.53) ha una parte immaginaria. Questo implica che asintoticamente esista uno sfasamento tra funzione d'onda diffusa e libera. Nella Bethe-Goldstone (8.16) non c'è questo termine immaginario, quindi 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 tronciamo lo sviluppo di Goldstone (8.1). 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

$$U = \sum_{\alpha} \langle \phi_{\alpha} | \mathcal{G}(W) | \phi_{\alpha} \rangle \quad (8.69)$$

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 (8.69) su tutto lo spazio, si ha una maggiore consistenza del calcolo, ovvero il risultato è praticamente indipendente dalla scelta di U .

Capitolo 9

Applicazioni del principio variazionale

9.1 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.

Le proprietà del principio variazionale sono descritte nei manuali di Meccanica Quantistica, ad esempio [Mes61]. Un riassunto dei punti di nostro interesse riguardanti il principio variazionale si trova nell'Appendice B.

In questo capitolo, presento due applicazioni del principio variazionale che nel linguaggio della fisica dei molti corpi sono classificate come teorie di campo medio: Hartree-Fock e teoria del funzionale della densità.

9.2 Hartree-Fock

9.2.1 Hamiltoniana Hartree-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. (5.56).

$$\begin{aligned} H &= \sum_{\nu\nu'} T_{\nu\nu'} a_{\nu}^{\dagger} a_{\nu'} + \frac{1}{2} \sum_{\nu\mu\nu'\mu'} V_{\nu\nu'\mu\mu'} a_{\nu}^{\dagger} a_{\mu}^{\dagger} a_{\mu'} a_{\nu'} \\ &= \sum_{\nu\nu'} T_{\nu\nu'} a_{\nu}^{\dagger} a_{\nu'} + \frac{1}{4} \sum_{\nu\nu'\mu\mu'} \bar{V}_{\nu\mu\nu'\mu'} a_{\nu}^{\dagger} a_{\mu}^{\dagger} a_{\mu'} a_{\nu'} . \end{aligned} \quad (9.1)$$

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

$$\bar{V}_{\nu\mu\nu'\mu'} \equiv \langle \nu\mu | V | \nu'\mu' \rangle - \langle \nu\mu | V | \mu'\nu' \rangle . \quad (9.2)$$

Dalla definizione di contrazione (vedi sezione 6.3), per ν e $\nu' < \epsilon_F$ si ha che

$$\overline{a_\nu^+ a_{\nu'}} = \delta_{\nu\nu'} \quad ; \quad \overline{a_\nu^+ a_{\nu'}^+} = 0 \quad ; \quad \overline{a_\nu a_{\nu'}} = 0 \quad ; \quad \overline{a_\nu a_{\nu'}^+} = 0 \quad . \quad (9.3)$$

Considerando la definizione di prodotto normale ordinato N otteniamo

$$a_\nu^+ a_{\nu'} = N[a_\nu^+ a_{\nu'}] + \overline{a_\nu^+ a_{\nu'}} \quad , \quad (9.4)$$

e, per il teorema di Wick,

$$\begin{aligned} a_\nu^+ a_\mu^+ a_{\mu'} a_{\nu'} &= N[a_\nu^+ a_\mu^+ a_{\mu'} a_{\nu'}] \\ &+ N[a_\mu^+ a_{\mu'}] \overline{a_\nu^+ a_{\nu'}} + N[a_\nu^+ a_{\nu'}] \overline{a_\mu^+ a_{\mu'}} \\ &- N[a_\mu^+ a_{\nu'}] \overline{a_\nu^+ a_{\mu'}} - N[a_\nu^+ a_{\mu'}] \overline{a_\mu^+ a_{\nu'}} \\ &+ \overline{a_\mu^+ a_{\mu'}} \overline{a_\nu^+ a_{\nu'}} - \overline{a_\nu^+ a_{\mu'}} \overline{a_\mu^+ a_{\nu'}} \quad . \end{aligned} \quad (9.5)$$

Inseriamo l'ultima espressione nell'equazione (9.1)

$$\begin{aligned} H &= \sum_{\nu\nu'} T_{\nu\nu'} a_\nu^+ a_{\nu'} + \frac{1}{4} \sum_{\mu\mu'\nu\nu'} \overline{V}_{\nu\mu\nu'\mu'} \left\{ N[a_\nu^+ a_\mu^+ a_{\mu'} a_{\nu'}] \right. \\ &+ N[a_\mu^+ a_{\mu'}] \delta_{\nu\nu'} \delta_{\nu i} + N[a_\nu^+ a_{\nu'}] \delta_{\mu\mu'} \delta_{\mu i} - N[a_\mu^+ a_{\nu'}] \delta_{\nu\mu'} \delta_{\nu i} - N[a_\nu^+ a_{\mu'}] \delta_{\mu\nu'} \delta_{\mu i} \\ &\left. + \delta_{\nu\nu'} \delta_{\nu i} \delta_{\mu\mu'} \delta_{\mu j} - \delta_{\nu\mu'} \delta_{\nu i} \delta_{\mu\nu'} \delta_{\mu j} \right\} \end{aligned} \quad (9.6)$$

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:

$$\begin{aligned} H &= \sum_{\nu\nu'} T_{\nu\nu'} a_\nu^+ a_{\nu'} + \frac{1}{4} \sum_{\mu\mu'\nu\nu'} \overline{V}_{\nu\mu\nu'\mu'} N[a_\nu^+ a_\mu^+ a_{\mu'} a_{\nu'}] \\ &+ \frac{1}{4} \sum_{\mu\mu' i} \overline{V}_{\mu i \mu' i} N[a_\mu^+ a_{\mu'}] + \frac{1}{4} \sum_{\nu\nu' i} \overline{V}_{i \nu i \nu'} N[a_\nu^+ a_{\nu'}] \\ &- \frac{1}{4} \sum_{\mu\nu' i} \overline{V}_{i \mu \nu' i} N[a_\mu^+ a_{\nu'}] - \frac{1}{4} \sum_{\nu\mu' i} \overline{V}_{\nu i i \mu'} N[a_\nu^+ a_{\mu'}] \\ &+ \frac{1}{4} \sum_{ij} \overline{V}_{ij ij} - \frac{1}{4} \sum_{ij} \overline{V}_{ij ji} \quad . \end{aligned} \quad (9.7)$$

La definizione (9.2) dell'interazione antisimmetrica implica le seguenti simmetrie

$$\overline{V}_{\nu\mu\nu'\mu'} = -\overline{V}_{\mu\nu\nu'\mu'} = \overline{V}_{\mu\nu\mu'\nu'} = -\overline{V}_{\nu\mu\mu'\nu'} \quad , \quad (9.8)$$

quindi

$$\begin{aligned} H &= \sum_{\nu\nu'} T_{\nu\nu'} a_\nu^+ a_{\nu'} + \frac{1}{4} \sum_{\mu\mu'\nu\nu'} \overline{V}_{\nu\mu\nu'\mu'} N[a_\nu^+ a_\mu^+ a_{\mu'} a_{\nu'}] \\ &+ \sum_{\nu\nu' i} \overline{V}_{i \nu i \nu'} N[a_\nu^+ a_{\nu'}] + \frac{1}{2} \sum_{ij} \overline{V}_{ij ij} \quad . \end{aligned} \quad (9.9)$$

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

$$N[a_\nu^+ a_{\nu'}] = a_\nu^+ a_{\nu'} - \overline{a_\nu^+ a_{\nu'}} , \quad (9.10)$$

quindi il penultimo termine della (9.9) diventa

$$\sum_{\nu\nu'i} \bar{V}_{\nu i \nu' i} N[a_\nu^+ a_{\nu'}] = \sum_{\nu\nu'i} \bar{V}_{\nu i \nu' i} a_\nu^+ a_{\nu'} - \sum_{ij} \bar{V}_{ijij} , \quad (9.11)$$

e l'operatore hamiltoniano può essere scritto come

$$\begin{aligned} H &= \sum_{\nu\nu'} \left(T_{\nu\nu'} + \sum_i \bar{V}_{\nu i \nu' i} \right) a_\nu^+ a_{\nu'} \\ &+ \frac{1}{4} \sum_{\mu\mu'\nu\nu'} \bar{V}_{\nu\mu\nu'\mu'} N[a_\nu^+ a_\mu^+ a_{\mu'} a_{\nu'}] - \frac{1}{2} \sum_{ij} \bar{V}_{ijij} . \end{aligned} \quad (9.12)$$

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 (9.12), ovvero

$$h_{\nu\nu'} = T_{\nu\nu'} + \sum_i \bar{V}_{\nu i \nu' i} , \quad (9.13)$$

quindi

$$\langle \nu | h | \nu \rangle = \epsilon_\nu . \quad (9.14)$$

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

$$H = \sum_\nu \epsilon_\nu a_\nu^+ a_\nu - \frac{1}{2} \sum_{ij} \bar{V}_{ijij} + \frac{1}{4} \sum_{\mu\mu'\nu\nu'} \bar{V}_{\nu\mu\nu'\mu'} N[a_\nu^+ a_\mu^+ a_{\mu'} a_{\nu'}] = H_0 + V_{\text{res}} , \quad (9.15)$$

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 (9.15) sullo stato fondamentale del determinante di Slater costruito con gli autostati di h è

$$\begin{aligned} \langle \Phi_0 | H | \Phi_0 \rangle &= \langle \Phi_0 | H_0 | \Phi_0 \rangle + \langle \Phi_0 | V_{\text{res}} | \Phi_0 \rangle \\ &= \sum_\nu \epsilon_\nu \langle \Phi_0 | a_\nu^+ a_\nu | \Phi_0 \rangle - \frac{1}{2} \sum_{ij} \bar{V}_{ijij} \langle \Phi_0 | \Phi_0 \rangle \\ &+ \frac{1}{4} \sum_{\mu\mu'\nu\nu'} \bar{V}_{\nu\mu\nu'\mu'} \langle \Phi_0 | N[a_\nu^+ a_\mu^+ a_{\mu'} a_{\nu'}] | \Phi_0 \rangle \\ &= \sum_i \epsilon_i - \frac{1}{2} \sum_{ij} \bar{V}_{ijij} = \mathcal{E}_0 . \end{aligned} \quad (9.16)$$

I risultati importanti di questo paragrafo possono essere così riassunti.

- L'espressione (9.15) dell'hamiltoniano è solo una riscrittura dell'espressione (9.1) 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 (9.16) indica che l'energia totale non è semplicemente la somma delle energie degli stati di singola particella.

9.2.2 Equazioni di Hartree-Fock

Il calcolo dell'energia del sistema è effettuato utilizzando l'espressione (9.16). 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

$$\delta \left[E(\Phi) - \sum_{ij} \lambda_{ij} \langle i|j \rangle \right] = 0 , \quad (9.17)$$

ed utilizzando l'operatore hamiltoniano H

$$\delta \langle \Phi | H | \Phi \rangle - \sum_{ij} \lambda_{ij} \delta \langle i|j \rangle = 0 , \quad (9.18)$$

dove $|\Phi\rangle$ è il determinante di Slater è formato dalle funzioni d'onda $|i\rangle$ e λ_{ij} indica i moltiplicatori di Lagrange. Usando l'espressione (9.12) dell'operatore hamiltoniano ottengo

$$\sum_i \delta \langle i | T | i \rangle + \frac{1}{2} \sum_{ij} [\delta \langle ij | V | ij \rangle - \delta \langle ij | V | ji \rangle] - \sum_{ij} \lambda_{ij} \delta \langle i|j \rangle = 0 . \quad (9.19)$$

La variazione del prodotto delle due funzioni d'onda

$$\sum_{ij} \delta \langle ij | = \sum_{ij} [\langle \delta i | j \rangle + \langle i | \delta j \rangle] = 2 \sum_{ij} \langle \delta i | j \rangle , \quad (9.20)$$

quindi

$$\sum_i \langle \delta i | T | i \rangle + \sum_{ij} [\langle \delta ij | V | ij \rangle - \langle \delta ij | V | ji \rangle] - \sum_{ij} \lambda_{ij} \langle \delta i | j \rangle = 0 . \quad (9.21)$$

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

$$\langle \delta k | T | k \rangle + \sum_j [\langle \delta k | \langle j | V | j \rangle | k \rangle - \langle \delta k | \langle j | V | k \rangle | j \rangle] = \sum_j \lambda_{kj} \langle \delta k | j \rangle . \quad (9.22)$$

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

$$T|k\rangle + \sum_j [\langle j|V|j\rangle|k\rangle - \langle j|V|k\rangle|j\rangle] = \sum_j \lambda_{kj}|j\rangle . \quad (9.23)$$

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

$$\lambda_{kj} = \langle k|h|j\rangle . \quad (9.24)$$

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

$$\langle \tilde{k}|h|\tilde{j}\rangle = \epsilon_k \delta_{kj} . \quad (9.25)$$

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

$$|\tilde{k}\rangle = \sum_{k'} S_{kk'}|k'\rangle \quad \sum_{kk'} S_{kk'}^\dagger S_{k'k} = 1 . \quad (9.26)$$

Il determinante di Slater nella nuova base è data da

$$|\tilde{\Phi}\rangle = \det(S)|\Phi\rangle , \quad (9.27)$$

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 (qui ho sostituito k a \tilde{k} per non appesantire la scrittura)

$$h|k\rangle = T|k\rangle + \sum_j [\langle j|V|j\rangle|k\rangle - \langle j|V|k\rangle|j\rangle] = \epsilon_k|k\rangle . \quad (9.28)$$

Definisco il potenziale medio come

$$U(\mathbf{r}) = \sum_j \langle j|V|j\rangle = \sum_j \int d^3r' \phi_j^*(\mathbf{r}') V(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \phi_j(\mathbf{r}') , \quad (9.29)$$

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

$$W(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \sum_j \phi_j^*(\mathbf{r}') V(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \phi_j(\mathbf{r}) . \quad (9.30)$$

Nello spazio delle configurazioni l'equazione (9.28) può essere espressa come

$$h\phi_k(\mathbf{r}) = -\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} \phi_k(\mathbf{r}) + \underbrace{U(\mathbf{r})\phi_k(\mathbf{r})}_{\text{Hartree}} - \underbrace{\int d^3r' W(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \phi_k(\mathbf{r}')}_{\text{Fock-Dirac}} = \epsilon_k \phi_k(\mathbf{r}) . \quad (9.31)$$

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 (9.31) 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 (9.29) e di Fock-Dirac (9.30) che vengono inseriti nell'equazione differenziale (9.31). La soluzione delle equazioni (9.31), 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 (9.16).

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

$$|\Phi(A-1)\rangle = \frac{a_k |\Phi_0(A)\rangle}{\mathcal{N}(A)} , \quad (9.32)$$

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

$$\begin{aligned} E(A) - E(A-1) &= \frac{\langle \Phi(A) | H | \Phi(A) \rangle}{\langle \Phi(A) | \Phi(A) \rangle} - \frac{\langle \Phi(A-1) | H | \Phi(A-1) \rangle}{\langle \Phi(A-1) | \Phi(A-1) \rangle} \\ &= \left[\sum_{i=1,A} \epsilon_i - \frac{1}{2} \sum_{i=1,A; j=1,A} \bar{V}_{ijij} \right] - \left[\sum_{i=1,A; i \neq k} \epsilon_i - \frac{1}{2} \sum_{i=1,A; i \neq k} \sum_{j=1,A; j \neq k} \bar{V}_{ijij} \right] \\ &= \left[\sum_{i=1,A} - \sum_{i=1,A; i \neq k} \right] \epsilon_i - \frac{1}{2} \left[\sum_{ij} - \sum_{ij; i \neq k, j \neq k} \right] \bar{V}_{ijij} \\ &= \epsilon_k - \frac{1}{2} \bar{V}_{kkkk} = \epsilon_k , \end{aligned} \quad (9.33)$$

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.

9.2.3 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 2.3 abbiamo considerato e definito come *gas di Fermi*.

Riscrivo le equazioni Hartree-Fock nello spazio delle coordinate

$$\begin{aligned} -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \phi_k(\mathbf{r}) &+ \sum_{k' \leq k_F} \int d^3 r' |\phi_{k'}(\mathbf{r}')|^2 V(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \\ &- \sum_{k' \leq k_F} \int d^3 r' \phi_{k'}^*(\mathbf{r}') V(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \phi_k(\mathbf{r}') \phi_{k'}(\mathbf{r}) = \epsilon_k \phi_k(\mathbf{r}) , \end{aligned} \quad (9.34)$$

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 (2.40), e soddisfano l'equazione di Schrödinger di particella libera

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \phi_k(\mathbf{r}) = \epsilon_k^{(0)} \phi_k(\mathbf{r}) . \quad (9.35)$$

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 l'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

$$v(\mathbf{k}) = \int d^3x V(\mathbf{x}) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} . \quad (9.36)$$

Considero il terzo termine della (9.34), il termine di Fock-Dirac, inserendo il termine di normalizzazione (2.48)

$$\begin{aligned} & \frac{\mathcal{V}}{(2\pi)^3} \int d^3k' \Theta(k_F - k) \int d^3\mathbf{r}' \frac{e^{-i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{r}'}}{\mathcal{V}^{1/2}} [e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}'}] V(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \frac{e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}'}}{\mathcal{V}^{1/2}} \frac{e^{-i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{r}}}{\mathcal{V}^{1/2}} \\ &= \frac{1}{(2\pi)^3} \int d^3k' \Theta(k_F - k) \int d^3(r' - r) e^{i(\mathbf{k}' - \mathbf{k})\cdot(\mathbf{r}' - \mathbf{r})} V(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \frac{e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}}{\mathcal{V}^{1/2}} \\ &= \frac{1}{(2\pi)^3} \int d^3k' \Theta(k_F - k) v(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \frac{e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}}{\mathcal{V}^{1/2}} . \end{aligned} \quad (9.37)$$

Dato che la densità del sistema è definita come, (2.51),

$$\rho(r) = \sum_{k \leq k_F} |\phi_a(\mathbf{r})|^2 , \quad (9.38)$$

usando la (9.35) posso riscrivere l'equazione di Hartree-Fock (9.34) come

$$\left[\epsilon_k^{(0)} + \rho v(0) - \frac{1}{(2\pi)^3} \int d^3k' \Theta(k_F - k) v(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \right] \phi_k(\mathbf{r}) = \epsilon_k \phi_k(\mathbf{r}) . \quad (9.39)$$

dove

$$v(0) = \int d^3x V(\mathbf{x}) \quad (9.40)$$

è detto integrale di volume dell'interazione.

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

$$\epsilon_k = \epsilon_k^{(0)} + \mathcal{U}_{\text{HF}}(\mathbf{k}) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + \mathcal{U}_{\text{HF}}(\mathbf{k}) , \quad (9.41)$$

dove

$$\mathcal{U}_{\text{HF}}(\mathbf{k}) = \rho v(0) - \frac{1}{(2\pi)^3} \int d^3k' \Theta(k_F - k') v(\mathbf{k} - \mathbf{k}') . \quad (9.42)$$

9.3 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.(9.31). 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.

9.3.1 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

$$H = T + V_{ext} + W, \quad (9.43)$$

dove

$$T = \sum_{i=1} -\hbar^2 \frac{\nabla_i^2}{2m}, \quad V_{ext} = \sum_{i=1} v_{ext}(i), \quad W = \frac{1}{2} \sum_{ij} w(i, j), \quad (9.44)$$

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 (9.44) che abbiano 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 contiene 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.

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

$$\rho_0(\mathbf{r}) = \langle \Psi_0 | \sum_{i=1}^N \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i) | \Psi_0 \rangle \quad (9.45)$$

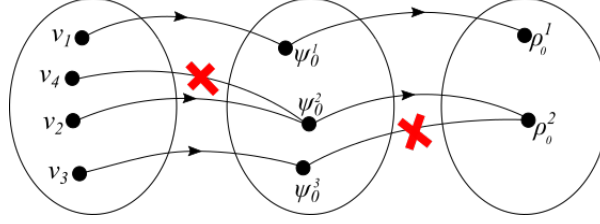


Figura 9.1:

Questo significa 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. 9.1 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 degenere, 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 abbiamo

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

e dividendo per $|\Psi_0\rangle$ otteniamo

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

L'equazione precedente implica che $v_{ext}(\mathbf{r}_i) - v'_{ext}(\mathbf{r}_i)$ sia costante per ogni valore di r_i e per ogni i , cioè che i due potenziali differiscano per una costante. Se escludiamo questa situazione l'equazione di sopra porta una contraddizione. La parte sinistra cambia al variare di \mathbf{r} , mentre la parte destra rimane costante. Quindi 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 disuguaglianza

$$E_0 = \langle \Psi_0 | H | \Psi_0 \rangle < \langle \Psi'_0 | H | \Psi'_0 \rangle \quad (9.46)$$

dove H è l'hamiltoniana di cui Ψ_0 è autostato, e la disuguaglianza 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 (9.46), ma potrebbe essere ripetuto invertendo il ruolo delle due hamiltoniane. Si otterrebbe quindi

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

da cui, sommando membro a membro le due equazioni

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

che è un assurdo, per questa ragione c'è una mappatura univoca tra $|\Psi_0\rangle$ e ρ_0 .

Il teorema di Hohenberg-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

$$V_{ext} \Longleftrightarrow |\Psi_0\rangle \Longleftrightarrow \rho_0. \quad (9.47)$$

Questo significa che le tre quantità sono legate 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 che ogni osservabile sia un funzionale della densità $O[\rho]$. In particolare questo è vero per l'energia del sistema

$$E[\rho] = \langle \Psi[\rho] | H | \Psi[\rho] \rangle = F[\rho] + \int d^3r v_{ext}(\mathbf{r}) \rho_0(\mathbf{r}) \quad (9.48)$$

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

$$F[\rho] \equiv \langle \Psi[\rho] | T + W | \Psi[\rho] \rangle \quad (9.49)$$

- (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

$$E_0 \equiv E[\rho_0] < E[\rho] \quad (9.50)$$

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

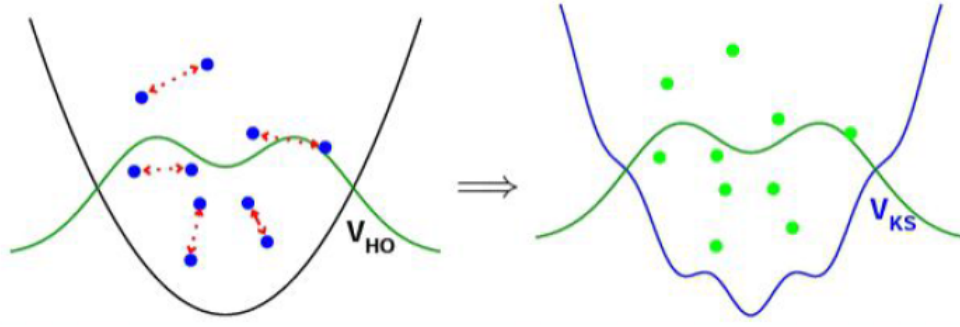


Figura 9.2:

9.3.2 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 9.2. La linea 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 (9.45) come somma di funzioni d'onda ortonormalizzate di singola particella

$$\rho_0(\mathbf{r}) = \rho_0^{\text{KS}}(\mathbf{r}) = \sum_{i < \epsilon_F} |\phi_i^{\text{KS}}(\mathbf{r})|^2 \quad (9.51)$$

dove KS indica Kohn-Sham. La densità (9.51) è generata da un'hamiltoniana ad un corpo, il cui autostato è un determinante di Slater $|\Phi^{\text{KS}}\rangle$.

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

$$E[\rho_0] = T^{\text{KS}}[\rho_0] + E_{\text{H}}^{\text{KS}}[\rho_0] + E_{\text{ext}}^{\text{KS}}[\rho_0] + E_{\text{xc}}^{\text{KS}}[\rho_0] \quad (9.52)$$

dove si ha il termine di energia cinetica

$$T^{\text{KS}}[\rho_0] = \langle \Phi^{\text{KS}} | T | \Phi^{\text{KS}} \rangle = \int d^3r \sum_i \phi_i^{*\text{KS}}(\mathbf{r}) \left(-\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} \right) \phi_i^{\text{KS}}(\mathbf{r}) \quad (9.53)$$

di Hartree

$$E_{\text{H}}^{\text{KS}}[\rho_0] = \sum_{ij} \int d^3r_i \int d^3r_j \rho_0(\mathbf{r}_i) w(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j) \rho_0(\mathbf{r}_j) \quad (9.54)$$

di campo medio esterno

$$E_{\text{ext}}^{\text{KS}}[\rho_0] = \sum_i \int d^3r \rho_0(\mathbf{r}_i) v_{\text{ext}}^{\text{KS}}(\mathbf{r}_i) \quad (9.55)$$

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

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

$$\left\{ -\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} + \int d^3 r_j w(\mathbf{r}, \mathbf{r}_j) \rho_0(\mathbf{r}_j) + v_{\text{ext}}^{KS}(\mathbf{r}) + v_{xc}^{KS}(\mathbf{r}) \right\} \phi_i^{KS}(\mathbf{r}) = \epsilon_i \phi_i^{KS}(\mathbf{r}) . \quad (9.56)$$

Anche questa equazione differenziale viene risolta con metodologie iterative analoghe a quelle utilizzate per l'equazione di Hartree-Fock.

- A differenza dell'equazione di Hartree-Fock nell'equazione (9.56) 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 siano uguali 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 (9.52) 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 (9.52) 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 $|\Phi^{KS}\rangle$ non rappresenta l'esatto stato fondamentale $|\Psi_0\rangle$. Tutto l'impianto della DFT è basato sull'uguaglianza delle densità (9.51). Le densità ad un corpo contengono informazioni molto meno ricche di quelle contenute negli autostati. Discuterò in maggiore dettaglio questo punto nel prossimo paragrafo.
- Le funzioni d'onda di singola particella $\phi_i^{KS}(\mathbf{r})$ non hanno un significato fisico determinato ma sono da considerarsi uno strumento matematico per poter ottenere la densità vera. 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.

9.4 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.

Utilizzo un formalismo che considera la densità nella forma più generale possibile, in modo che non dipenda da alcun modello. Esprimo la matrice densità di un sistema a multicorpi come

$$\rho(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}'_1) = \frac{A}{\langle \Psi | \Psi \rangle} \int d^3 r_2 d^3 r_3 \cdots d^3 r_A \Psi^*(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \cdots, \mathbf{r}_A) \Psi(\mathbf{r}'_1, \mathbf{r}_2, \cdots, \mathbf{r}_A) , \quad (9.57)$$

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 (9.57) vengono integrate tutte le coordinate tranne una. La matrice densità (9.57) è normalizzata al numero di particelle A , come si può vedere

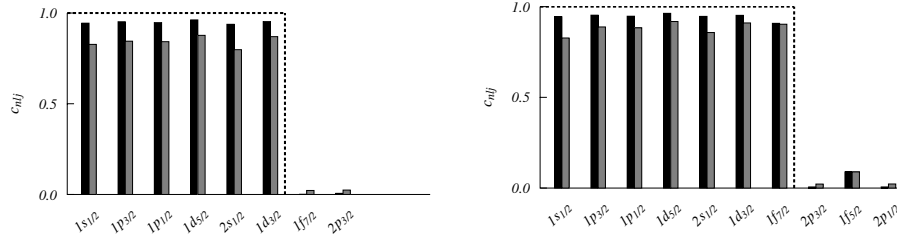


Figura 9.3: Confronto tra i numeri di occupazione del modello a particelle indipendenti, linee tratteggiate, e orbite naturali, linee degli istogrammi calcolati con due differenti correlazioni. Il sistema studiato è il nucleo ^{48}Ca . La figura a sinistra indica il risultato per i protoni, e quella a destra per i neutroni.

integrando sulle variabili \mathbf{r}_1 e \mathbf{r}'_1 e inserendo $\delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}'_1)$. 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 (9.57) il determinante di Slater si ottiene una matrice densità data da

$$\rho^{\text{IPM}}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}'_1) = \sum_{i \leq \epsilon_F} \phi_i^*(\mathbf{r}_1) \phi_i(\mathbf{r}'_1) \quad (9.58)$$

Le **funzioni d'onda di campo medio** sono quelle generate in un modello a particelle indipendenti che generano una densità del tipo (9.58).

Le **orbite naturali** sono definite come quelle funzioni d'onda di singola particella che diagonalizzano la matrice densità (9.57) che può essere descritta come

$$\rho(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}'_1) = \sum_{\alpha} c_{\alpha} \phi_{\alpha}^{*\text{NO}}(\mathbf{r}_1) \phi_{\alpha}^{\text{NO}}(\mathbf{r}'_1) \quad (9.59)$$

La differenza tra le espressioni (9.58) e (9.59) 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

$$\begin{aligned} A &= \int d^3r_1 \rho^{\text{IPM}}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}'_1) \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}'_1) \\ &= \int d^3r_1 \rho^{\text{NO}}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}'_1) \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}'_1) = \sum_{\alpha} c_{\alpha} \end{aligned} \quad (9.60)$$

Figura 9.4: Funzioni d'onda di singola particella, linee continue, e orbite naturali per tre stati neutronici del ^{48}Ca .

Questo permette di interpretare l'espressione (9.58) in analogia alla (9.59) nella quale i numeri di occupazione valgono 1 per gli stati sotto la superficie di Fermi, e 0 in alternativa.

Nella Fig. 9.3 confronto i numeri di occupazione del modello a particelle indipendenti con quelli ottenuti con 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.

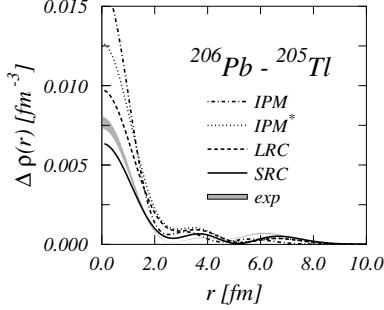


Figura 9.5: Differenza tra distribuzioni di carica dei nuclei ^{206}Pb e ^{205}Tl . IPM indica il risultato ottenuto con funzioni d'onda di campo medio. Le altre linee sono ottenute considerando correlazioni di vario tipo, a lungo e corto raggio, LRC e SRC rispettivamente.

Nella figura 9.5 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 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 9.57.

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 9.4 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 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

$$\psi_\alpha(\mathbf{r}) = \frac{\sqrt{A} \langle \Psi(A-1) | \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_A) | \Psi(A) \rangle}{\langle \Psi(A-1) | \Psi(A-1) \rangle^{1/2} \langle \Psi(A) | \Psi(A) \rangle^{1/2}} \quad (9.61)$$

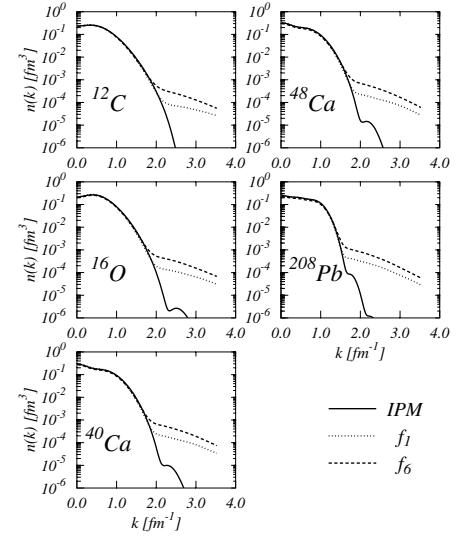


Figura 9.6: Distribuzioni di momento per cinque nuclei sferici e doppio magici ottenute nel modello a particelle indipendenti, IPM, e con una teoria che considera le correlazioni tra le particelle.

Un osservabile di questo tipo è la densità di momento, tradizionalmente indicata come $n(\mathbf{k})$, e definita come

$$n(\mathbf{k}) = \frac{1}{(2\pi)^3} \frac{1}{\langle \Psi | \Psi \rangle} \int d^3(r - r') e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}')} \rho(\mathbf{r}, \mathbf{r}') . \quad (9.62)$$

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 $k + dk$. Nella figura 9.6 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 (vedi il capitolo 12).

Capitolo 10

Funzioni di Green

Il formalismo presentato nei capitoli precedenti non ha utilizzato quell'entità nota come funzione di Green. In realtà la funzione di Green è estremamente utile nella descrizione dei sistemi a molticorpi per il calcolo di quantità osservabili anche diverse dall'energia. Il calcolo delle funzioni di Green implica aspetti generali legati al problema a molticorpi, 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 risolvete 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 definite per un qualsiasi numero di corpi. La difficoltà nel risolvere questo sistema di equazioni accoppiate spinge a formulare una tecnica alternativa, basata sulla teoria perturbativa. Questo sarà il soggetto del capitolo 11.

10.1 Funzioni di Green ad un corpo

L'operatore di campo fermionico in rappresentazione di Heisenberg è definito come

$$\psi_{H,\alpha}(\mathbf{x}, t) = e^{\frac{i}{\hbar} H t} \psi_{\alpha}(\mathbf{x}) e^{-\frac{i}{\hbar} H t} \quad (10.1)$$

Nell'equazione precedente il pedice 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

$$i G_{\alpha\beta}(\mathbf{x}, t, \mathbf{x}', t') = \frac{\langle \Psi_0 | T \left[\psi_{H,\alpha}(\mathbf{x}, t) \psi_{H,\beta}^+(\mathbf{x}', t') \right] | \Psi_0 \rangle}{\langle \Psi_0 | \Psi_0 \rangle} \quad (10.2)$$

Nell'equazione precedente $|\Psi_0\rangle$ è lo stato fondamentale del sistema in rappresentazione di Heisenberg

$$H|\Psi_0\rangle = E|\Psi_0\rangle \quad (10.3)$$

e T indica l'operatore di ordinamento temporale

$$T \left[\psi_{H,\alpha}(\mathbf{x}, t) \psi_{H,\beta}^+(\mathbf{x}', t') \right] = \begin{cases} \psi_{H,\alpha}(\mathbf{x}, t) \psi_{H,\beta}^+(\mathbf{x}', t') & t > t' \\ - \psi_{H,\beta}^+(\mathbf{x}', t') \psi_{H,\alpha}(\mathbf{x}, t) & t < t' \end{cases} \quad (10.4)$$

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.

Facendo l'ipotesi che l'hamiltoniana H sia indipendente dal tempo, posso scrivere la funzione di Green (10.2) come

$$i G(\mathbf{x}, t, \mathbf{x}', t') = \begin{cases} e^{\frac{i}{\hbar} E(t-t')} \frac{\langle \Psi_0 | \psi(\mathbf{x}) e^{-\frac{i}{\hbar} H(t-t')} \psi^+(\mathbf{x}') | \Psi_0 \rangle}{\langle \Psi_0 | \Psi_0 \rangle} & t > t' \\ - e^{-\frac{i}{\hbar} E(t-t')} \frac{\langle \Psi_0 | \psi^+(\mathbf{x}') e^{\frac{i}{\hbar} H(t-t')} \psi(\mathbf{x}) | \Psi_0 \rangle}{\langle \Psi_0 | \Psi_0 \rangle} & t < t' \end{cases} . \quad (10.5)$$

Per calcolare il valore di aspettazione di un operatore ad un corpo nello stato fondamentale del sistema, utilizzo la definizione di operatore ad un corpo

$$\mathcal{O}^I = \int d^3x \psi^+(\mathbf{x}) \mathcal{O}(\mathbf{x}) \psi(\mathbf{x}) . \quad (10.6)$$

Possiamo scrivere il suo valore di aspettazione rispetto allo stato fondamentale come

$$\langle \mathcal{O}^I \rangle = \int d^3x \frac{\langle \Psi_0 | \psi^+(\mathbf{x}) \mathcal{O}(\mathbf{x}) \psi(\mathbf{x}) | \Psi_0 \rangle}{\langle \Psi_0 | \Psi_0 \rangle} = \int d^3x \lim_{\mathbf{x}' \rightarrow \mathbf{x}} \mathcal{O}(\mathbf{x}) \frac{\langle \Psi_0 | \psi^+(\mathbf{x}') \psi(\mathbf{x}) | \Psi_0 \rangle}{\langle \Psi_0 | \Psi_0 \rangle} . \quad (10.7)$$

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 (10.5) ed indicando con t^+ un tempo maggiore di t otteniamo

$$\langle \mathcal{O}^I \rangle = -i \lim_{t' \rightarrow t^+ \rightarrow t} \int d^3x \lim_{\mathbf{x} \rightarrow \mathbf{x}'} \mathcal{O}(\mathbf{x}) G(\mathbf{x}, t, \mathbf{x}', t') . \quad (10.8)$$

Faccio un esempio con l'operatore densità. L'operatore numero di particelle può essere scritto in funzione dell'operatore densità $\rho(\mathbf{x} - \mathbf{x}') = \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}')$ come

$$\mathcal{N} \equiv \int d^3x \psi^+(\mathbf{x}) \rho(\mathbf{x}) \psi(\mathbf{x}) = \int d^3x \psi^+(\mathbf{x}) \psi(\mathbf{x}) \quad (10.9)$$

Il valore di aspettazione di questo operatore rispetto allo stato fondamentale del sistema è:

$$\begin{aligned} \langle \mathcal{N} \rangle &= -i \lim_{t' \rightarrow t^+} \int d^3x \lim_{\mathbf{x} \rightarrow \mathbf{x}'} \rho(\mathbf{x}) G(\mathbf{x}, t, \mathbf{x}', t') \\ &= -i \lim_{t' \rightarrow t^+} \int d^3x \lim_{\mathbf{x} \rightarrow \mathbf{x}'} G(\mathbf{x}, t, \mathbf{x}', t') \\ &= -i \int d^3x G(\mathbf{x}, t, \mathbf{x}, t) = \int d^3x \frac{\langle \Psi_0 | \psi^+(\mathbf{x}) \psi(\mathbf{x}) | \Psi_0 \rangle}{\langle \Psi_0 | \Psi_0 \rangle} \end{aligned} \quad (10.10)$$

Nel caso di fermioni non interagenti, cioè $|\Psi_0\rangle = |\Phi_0\rangle$, abbiamo

$$\langle \mathcal{N} \rangle = \int d^3x \frac{\langle \Phi_0 | \psi^+(\mathbf{x}) \psi(\mathbf{x}) | \Phi_0 \rangle}{\langle \Phi_0 | \Phi_0 \rangle} \quad (10.11)$$

Usando la rappresentazione degli operatori di campo in termini di operatori di creazione e di distruzione, eq. (5.50) e (5.51), otteniamo

$$\begin{aligned}\langle \mathcal{N} \rangle &= \int d^3x \sum_{\alpha, \alpha'} \phi_{\alpha}^*(\mathbf{x}) \phi_{\alpha'}(\mathbf{x}) \langle \Phi_0 | a_{\alpha}^+ a_{\alpha'} | \Phi_0 \rangle \\ &= \int d^3x \sum_{\alpha, \alpha'=1}^{\epsilon_F} \phi_{\alpha}^*(\mathbf{x}) \phi_{\alpha'}(\mathbf{x}) \delta_{\alpha, \alpha'} = \int d^3x \sum_{\alpha=1}^{\epsilon_F} |\phi_{\alpha}(x)|^2, \end{aligned} \quad (10.12)$$

dove ho ipotizzato $|\Phi_0\rangle$ normalizzato ad uno e l'ortonormalità delle funzioni di singola particella ϕ_{α} . Come nei capitoli precedenti, ϵ_F indica 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:

$$[A, BC] = ABC - BCA = ABC - BCA + BAC - BAC \quad (10.13)$$

$$[A, BC] = \{A, B\}C - B\{A, C\} \quad (10.14)$$

$$[A, BC] = [A, B]C - B[C, A], \quad (10.15)$$

e anche

$$\{A, BC\} = \{A, B\}C - B[A, C]. \quad (10.16)$$

Consideriamo il commutatore dell'hamiltoniana

$$\begin{aligned}H &= T + V = \int d^3x \psi^+(\mathbf{x}) \left(-\hbar^2 \frac{\nabla_{\mathbf{x}}^2}{2m} \right) \psi(\mathbf{x}) \\ &+ \frac{1}{2} \int d^3x d^3y \psi^+(\mathbf{x}) \psi^+(\mathbf{y}) V(\mathbf{x}, \mathbf{y}) \psi(\mathbf{y}) \psi(\mathbf{x}), \end{aligned} \quad (10.17)$$

con l'operatore $\psi(\mathbf{r})$. Calcoliamo il commutatore con il termine di energia cinetica

$$[\psi(\mathbf{r}), T] = \left[\underbrace{\psi(\mathbf{r})}_A, \int d^3x \underbrace{\psi^+(\mathbf{x})}_B \underbrace{\left(-\hbar^2 \frac{\nabla_{\mathbf{x}}^2}{2m} \right) \psi(\mathbf{x})}_C \right]. \quad (10.18)$$

Applico l'equazione (10.14)

$$\begin{aligned}[\psi(\mathbf{r}), T] &= \int d^3x \underbrace{\{\psi(\mathbf{r}), \psi^+(\mathbf{x})\}}_{\delta(\mathbf{x}-\mathbf{r})} \left(-\hbar^2 \frac{\nabla_{\mathbf{x}}^2}{2m} \psi(\mathbf{x}) \right) - \int d^3x \psi^+(\mathbf{x}) \left(-\hbar^2 \frac{\nabla_{\mathbf{x}}^2}{2m} \right) \underbrace{\{\psi(\mathbf{r}), \psi(\mathbf{x})\}}_0 \\ &= \int d^3x \delta(\mathbf{x} - \mathbf{r}) \left(-\hbar^2 \frac{\nabla_{\mathbf{x}}^2}{2m} \psi(\mathbf{x}) \right) = -\frac{\hbar^2 \nabla_{\mathbf{r}}^2}{2m} \psi(\mathbf{r}). \end{aligned} \quad (10.19)$$

Per il termine di interazione

$$[\psi(\mathbf{r}), V] = \frac{1}{2} \int d^3x d^3y \left[\underbrace{\psi(\mathbf{r})}_A, \underbrace{\psi^+(\mathbf{x}) \psi^+(\mathbf{y})}_B \underbrace{V(\mathbf{x}, \mathbf{y}) \psi(\mathbf{y}) \psi(\mathbf{x})}_C \right]. \quad (10.20)$$

Applico l'equazione (10.14)

$$\begin{aligned}
[\psi(\mathbf{r}), V] &= \frac{1}{2} \int d^3x d^3y \left[\underbrace{\{\psi(\mathbf{r}), \psi^+(\mathbf{x})\}}_{\delta(\mathbf{r}-\mathbf{x})} C - \psi^+(\mathbf{x}) \underbrace{\left\{ \underbrace{\psi(\mathbf{r})}_{A'} \underbrace{\psi^+(\mathbf{y})}_{B'} \underbrace{V(\mathbf{x}, \mathbf{y}) \psi(\mathbf{y}) \psi(\mathbf{x})}_{C'} \right\}} \right] \\
&= \frac{1}{2} \int d^3y \psi^+(\mathbf{y}) V(\mathbf{r}, \mathbf{y}) \psi(\mathbf{y}) \psi(\mathbf{r}) \\
&+ \frac{1}{2} \int d^3x d^3y (-\psi^+(\mathbf{x})) \underbrace{\{\psi(\mathbf{r}), \psi^+(\mathbf{x})\}}_{\delta(\mathbf{r}-\mathbf{y})} V(\mathbf{x}, \mathbf{y}) \underbrace{\psi(\mathbf{y}) \psi(\mathbf{x})}_{-\psi(\mathbf{x}) \psi(\mathbf{y})} \\
&- \frac{1}{2} \int d^3x d^3y (-\psi^+(\mathbf{x})) \psi^+(\mathbf{y}) V(\mathbf{x}, \mathbf{y}) \underbrace{[\psi(\mathbf{r}), \psi(\mathbf{y}) \psi(\mathbf{x})]}_0 \\
&= \frac{1}{2} \int d^3y \psi^+(\mathbf{y}) V(\mathbf{r}, \mathbf{y}) \psi(\mathbf{y}) \psi(\mathbf{r}) + \frac{1}{2} \int d^3x \psi^+(\mathbf{x}) V(\mathbf{x}, \mathbf{r}) \psi(\mathbf{x}) \psi(\mathbf{r}) . \tag{10.21}
\end{aligned}$$

dove ho utilizzato la (10.16) 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

$$[\psi(\mathbf{r}), V] = \int d^3x \psi^+(\mathbf{x}) V(\mathbf{r}, \mathbf{x}) \psi(\mathbf{x}) \psi(\mathbf{r}) . \tag{10.22}$$

Unendo le (10.19) e (10.22) ottengo

$$[\psi(\mathbf{r}), H] = -\hbar^2 \frac{\nabla_{\mathbf{r}}^2}{2m} \psi(\mathbf{r}) + \int d^3x \psi^+(\mathbf{x}) V(\mathbf{r}, \mathbf{x}) \psi(\mathbf{x}) \psi(\mathbf{r}) . \tag{10.23}$$

Uso questa espressione nell'equazione del moto per l'operatore di campo in rappresentazione di Heisenberg

$$\begin{aligned}
i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi_H(\mathbf{r}, t) &= [\psi_H(\mathbf{r}, t), H] = e^{\frac{i}{\hbar} H t} [\psi(\mathbf{r}), H] e^{-\frac{i}{\hbar} H t} \\
&= -\hbar^2 \frac{\nabla_{\mathbf{r}}^2}{2m} \psi_H(\mathbf{r}, t) + \int d^3x \psi_H^+(\mathbf{x}, t) V(\mathbf{r}, \mathbf{x}) \psi_H(\mathbf{x}, t) \psi_H(\mathbf{r}, t) . \tag{10.24}
\end{aligned}$$

Moltiplico a sinistra per l'operatore $\psi_H^+(\mathbf{r}', t')$ e poi calcolo il valore di aspettazione sullo stato fondamentale $|\Psi_0\rangle$ e divido per la sua norma

$$\begin{aligned}
&\left[i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - \left(-\hbar^2 \frac{\nabla_{\mathbf{r}}^2}{2m} \right) \right] \frac{\langle \Psi_0 | \psi_H^+(\mathbf{r}', t') \psi_H(\mathbf{r}, t) | \Psi_0 \rangle}{\langle \Psi_0 | \Psi_0 \rangle} \\
&= \frac{1}{\langle \Psi_0 | \Psi_0 \rangle} \int d^3x \langle \Psi_0 | \psi_H^+(\mathbf{r}', t') \psi_H^+(\mathbf{x}, t) V(\mathbf{r}, \mathbf{x}) \psi_H(\mathbf{x}, t) \psi_H(\mathbf{r}, t) | \Psi_0 \rangle . \tag{10.25}
\end{aligned}$$

Considero il limite per $\mathbf{r}' \rightarrow \mathbf{r}$ e $t' \rightarrow t$ e, poi, integro su d^3r ,

$$\int d^3r \lim_{\mathbf{r}' \rightarrow \mathbf{r}} \lim_{t' \rightarrow t} \left[i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - \left(-\hbar^2 \frac{\nabla_{\mathbf{r}}^2}{2m} \right) \right] [-iG(\mathbf{r}, t, \mathbf{r}', t')] = 2 \frac{\langle \Psi_0 | V | \Psi_0 \rangle}{\langle \Psi_0 | \Psi_0 \rangle} , \tag{10.26}$$

dove il termine 2 è legato alla definizione di V data dalla (10.17).

Uso l'equazione (10.7) per calcolare il valore di aspettazione dell'operatore energia cinetica

$$\frac{\langle \Psi_0 | T | \Psi_0 \rangle}{\langle \Psi_0 | \Psi_0 \rangle} = -i \int d^3r \lim_{\mathbf{r}' \rightarrow \mathbf{r}} \lim_{t' \rightarrow t} \left(-\hbar^2 \frac{\nabla_{\mathbf{r}}^2}{2m} \right) G(\mathbf{r}, t, \mathbf{r}', t') . \tag{10.27}$$

Combinando queste due ultime equazioni posso eliminare il termine di potenziale dal valore di aspettazione dell'energia:

$$\begin{aligned} E_0 &= \frac{\langle \Psi_0 | T | \Psi_0 \rangle}{\langle \Psi_0 | \Psi_0 \rangle} + \frac{\langle \Psi_0 | V | \Psi_0 \rangle}{\langle \Psi_0 | \Psi_0 \rangle} \\ &= -\frac{i}{2} \int d^3r \lim_{\mathbf{r}' \rightarrow \mathbf{r}} \lim_{t' \rightarrow t} \left[i\hbar \frac{\partial}{\partial t} + \left(-\hbar^2 \frac{\nabla_{\mathbf{r}}^2}{2m} \right) \right] G(\mathbf{r}, t, \mathbf{r}', t') . \end{aligned} \quad (10.28)$$

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.

10.1.1 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

$$H \equiv H_0 = \sum_{\alpha} h_{\alpha} \quad (10.29)$$

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

$$\mathcal{O}_H \equiv e^{\frac{i}{\hbar} H t} \mathcal{O} e^{-\frac{i}{\hbar} H t} = e^{\frac{i}{\hbar} H_0 t} \mathcal{O} e^{-\frac{i}{\hbar} H_0 t} \equiv \mathcal{O}_I . \quad (10.30)$$

Consideriamo normalizzati ad uno gli stati $|\Phi_0\rangle$ del sistema non interagente. Per definizione, la funzione di Green assume l'espressione

$$\begin{aligned} i G^0(\mathbf{x}, t, \mathbf{x}', t') &= \langle \Phi_0 | T [\psi_I(\mathbf{x}, t) \psi_I^+(\mathbf{x}', t')] | \Phi_0 \rangle \\ &= \langle \Phi_0 | \psi_I(\mathbf{x}, t) \psi_I^+(\mathbf{x}', t') | \Phi_0 \rangle \Theta(t - t') - \langle \Phi_0 | \psi_I^+(\mathbf{x}', t') \psi_I(\mathbf{x}, t) | \Phi_0 \rangle \Theta(t' - t) . \end{aligned} \quad (10.31)$$

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

$$\psi_I(\mathbf{x}, t) = \sum_k a_k(t) \phi_k(\mathbf{x}) \quad \text{e} \quad \psi_I^+(\mathbf{x}, t) = \sum_k a_k^+(t) \phi_k^*(\mathbf{x}) , \quad (10.32)$$

quindi

$$\begin{aligned} i G^0(\mathbf{x}, t, \mathbf{x}', t') &= \langle \Phi_0 | \sum_k \phi_k(\mathbf{x}) a_k e^{-i\omega_k t} \sum_{k'} \phi_{k'}^*(\mathbf{x}') a_{k'}^+ e^{i\omega_{k'} t'} | \Phi_0 \rangle \Theta(t - t') \\ &\quad - \langle \Phi_0 | \sum_{k'} \phi_{k'}^*(\mathbf{x}') a_{k'}^+ e^{i\omega_{k'} t'} \sum_k \phi_k(\mathbf{x}) a_k e^{-i\omega_k t} | \Phi_0 \rangle \Theta(t' - t) \\ &= \sum_{k, k'} \phi_k(\mathbf{x}) \phi_{k'}^*(\mathbf{x}') e^{-i\omega_k t} e^{i\omega_{k'} t'} \\ &\quad \left[\langle \Phi_0 | a_k a_{k'}^+ | \Phi_0 \rangle \Theta(t - t') - \langle \Phi_0 | a_{k'}^+ a_k | \Phi_0 \rangle \Theta(t' - t) \right] , \end{aligned} \quad (10.33)$$

dove $\omega_k = E_k/\hbar$.

Per definizione di $|\Phi_0\rangle$ abbiamo che

$$\langle \Phi_0 | a_k a_{k'}^+ | \Phi_0 \rangle = \delta_{k, k'} \Theta(k' - k_F), \quad \text{e} \quad \langle \Phi_0 | a_{k'}^+ a_k | \Phi_0 \rangle = \delta_{k, k'} \Theta(k_F - k) . \quad (10.34)$$

Come abbiamo visto, in un sistema infinito

$$\phi_k(\mathbf{x}) = \frac{1}{\sqrt{\mathcal{V}}} e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}} . \quad (10.35)$$

La funzione di Green imperturbata (10.33) assume l'espressione

$$i G^0(\mathbf{x}, t, \mathbf{x}', t') = \frac{1}{\Omega} \sum_k e^{-i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{x} - \mathbf{x}')} e^{-i\omega_k(t-t')} [\Theta(k - k_F)\Theta(t - t') - \Theta(k_F - k)\Theta(t' - t)] . \quad (10.36)$$

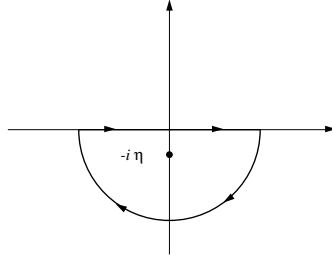


Figura 10.1: Contorno di integrazione per l'integrale (10.40)

Per un sistema infinito bisogna considerare la corrispondenza

$$\sum_k \rightarrow \frac{\mathcal{V}}{(2\pi)^3} \int d^3 k . \quad (10.37)$$

Utilizzando la rappresentazione integrale della funzione gradino

$$\Theta(x) = - \lim_{\eta \rightarrow 0} \int_{-\infty}^{\infty} dk \left(\frac{1}{2\pi i} \right) \frac{e^{-ikx}}{k + i\eta} , \quad (10.38)$$

posso scrivere

$$i G^0(\mathbf{x}, t, \mathbf{x}', t') = \frac{1}{(2\pi)^3} \int d^3 k e^{-i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{x} - \mathbf{x}')} e^{-i\omega_k(t-t')} \left[- \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega'}{2\pi i} \frac{e^{-i\omega'(t-t')}}{\omega' + i\eta} \Theta(k - k_F) - \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega'}{2\pi i} \frac{e^{-i\omega'(t-t')}}{\omega' - i\eta} \Theta(k_F - k) \right] . \quad (10.39)$$

Calcoliamo l'integrale dell'equazione (10.38) utilizzando il teorema dei residui

$$\int_{-\infty}^{\infty} dk \frac{1}{2\pi i} \frac{e^{-ikx}}{k + i\eta} = - \lim_{\eta \rightarrow 0} 2\pi i \frac{1}{2\pi i} (k + i\eta) \frac{e^{-ikx}}{k + i\eta} = -e^{-\eta x} , \quad (10.40)$$

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

$$\lim_{\eta \rightarrow 0} -e^{-\eta x} = -1 . \quad (10.41)$$

da cui la (10.38) .

Raggruppando e moltiplicando per $-i$ ottengo

$$G^0(\mathbf{x}, t, \mathbf{x}', t') = \frac{1}{(2\pi)^4} \int d^3k e^{-i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{x}-\mathbf{x}')} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega' e^{-i\omega'(t-t')} e^{-i\omega_k(t-t')} \left[\frac{\Theta(k - k_F)}{\omega' + i\eta} + \frac{\Theta(k_F - k)}{\omega' - i\eta} \right] . \quad (10.42)$$

Definendo una nuova variabile $\omega = \omega' + \omega_k$ posso riscrivere l'equazione precedente come

$$G^0(\mathbf{x}, t, \mathbf{x}', t') = \frac{1}{(2\pi)^4} \int d^3k e^{-i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{x}-\mathbf{x}')} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega e^{-i\omega(t-t')} \left[\frac{\Theta(k - k_F)}{\omega - \omega_k + i\eta} + \frac{\Theta(k_F - k)}{\omega - \omega_k - i\eta} \right] , \quad (10.43)$$

dalla quale posso definire la funzione di Green imperturbata dipendente dall'impulso ed dall'energia

$$\tilde{G}^0(\mathbf{k}, \omega) \equiv \left[\frac{\Theta(k - k_F)}{\omega - \omega_k + i\eta} + \frac{\Theta(k_F - k)}{\omega - \omega_k - i\eta} \right] . \quad (10.44)$$

10.1.2 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

$$\begin{aligned} i G(\mathbf{x}, t, \mathbf{x}', t') &= \langle \Psi_0 | T [\psi_H(\mathbf{x}, t) \psi_H^\dagger(\mathbf{x}', t')] | \Psi_0 \rangle \\ &= \sum_n [\langle \Psi_0 | \psi_H(\mathbf{x}, t) | \Psi_n \rangle \langle \Psi_n | \psi_H^\dagger(\mathbf{x}', t') | \Psi_0 \rangle \Theta(t - t') \\ &\quad - \langle \Psi_0 | \psi_H^\dagger(\mathbf{x}', t') | \Psi_n \rangle \langle \Psi_n | \psi_H(\mathbf{x}, t) | \Psi_0 \rangle \Theta(t' - t)] \end{aligned} \quad (10.45)$$

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 A il numero di particelle autovalore dell'operatore numero di particelle

$$\mathcal{N} = \int d^3x \psi^\dagger(\mathbf{x}) \psi(\mathbf{x}) . \quad (10.46)$$

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

$$[\mathcal{N}, \psi] = -\psi , \quad \mathcal{N}\psi - \psi\mathcal{N} = -\psi , \quad \mathcal{N}\psi = \psi(\mathcal{N} - 1) \quad (10.47)$$

quindi

$$\mathcal{N}\psi|\Psi_0\rangle = \psi(\mathcal{N} - 1)|\Psi_0\rangle = \psi(A - 1)|\Psi_0\rangle = (A - 1)\psi|\Psi_0\rangle , \quad (10.48)$$

che indica che gli stati del secondo termine dell'equazione (10.45) hanno una particella in meno degli stati $|\Psi_0\rangle$.

Esplicitiamo nell'equazione (10.45) gli operatori di campo in rappresentazione di Schrödinger

$$\mathcal{O}_H = e^{\frac{i}{\hbar} H t} \mathcal{O}_S e^{-\frac{i}{\hbar} H t} , \quad (10.49)$$

$$\begin{aligned} i G(\mathbf{x}, t, \mathbf{x}', t') &= \sum_n \left[\Theta(t - t') e^{-\frac{i}{\hbar} (E_n - E_0)(t - t')} \langle \Psi_0 | \psi(\mathbf{x}) | \Psi_n \rangle \langle \Psi_n | \psi^+(\mathbf{x}') | \Psi_0 \rangle \right. \\ &\quad \left. - \Theta(t - t') e^{\frac{i}{\hbar} (E_n - E_0)(t - t')} \langle \Psi_0 | \psi^+(\mathbf{x}') | \Psi_n \rangle \langle \Psi_n | \psi(\mathbf{x}) | \Psi_0 \rangle \right] . \end{aligned} \quad (10.50)$$

Sostituiamo le espressioni degli operatori di campo

$$\psi(\mathbf{x}) = \sum_k a_k \phi_k(\mathbf{x}) \quad \text{e} \quad \psi^+(\mathbf{x}) = \sum_k a_k^+ \phi_k^*(\mathbf{x}) \quad (10.51)$$

$$\begin{aligned} i G(\mathbf{x}, t, \mathbf{x}', t') &= \sum_n \left[\Theta(t - t') e^{-\frac{i}{\hbar} (E_n - E_0)(t - t')} \sum_{k, k'} \phi_k(\mathbf{x}) \phi_{k'}^*(\mathbf{x}') \langle \Psi_0 | a_k | \Psi_n \rangle \langle \Psi_n | a_{k'}^+ | \Psi_0 \rangle \right. \\ &\quad \left. - \Theta(t' - t) e^{\frac{i}{\hbar} (E_n - E_0)(t - t')} \sum_{k, k'} \phi_k(\mathbf{x}) \phi_{k'}^*(\mathbf{x}') \langle \Psi_0 | a_{k'}^+ | \Psi_n \rangle \langle \Psi_n | a_k | \Psi_0 \rangle \right] . \end{aligned} \quad (10.52)$$

Considerando che, per un sistema infinito, sono valide la (10.35) e la (10.37) possiamo scrivere

$$\begin{aligned} i G(\mathbf{x}, t, \mathbf{x}', t') &= \\ &\sum_n \left[\Theta(t - t') e^{-\frac{i}{\hbar} (E_n - E_0)(t - t')} \frac{1}{(2\pi)^3} \int d^3 k e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{x} - \mathbf{x}')} \langle \Psi_0 | a_k | \Psi_n \rangle \langle \Psi_n | a_k^+ | \Psi_0 \rangle \right. \\ &\quad \left. - \Theta(t' - t) e^{\frac{i}{\hbar} (E_n - E_0)(t - t')} \frac{1}{(2\pi)^3} \int d^3 k e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{x} - \mathbf{x}')} \langle \Psi_0 | a_k^+ | \Psi_n \rangle \langle \Psi_n | a_k | \Psi_0 \rangle \right] . \end{aligned} \quad (10.53)$$

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 (10.38)

$$\begin{aligned} G(\mathbf{x}, t, \mathbf{x}', t') &= \frac{1}{(2\pi)^4} \int d^3 k e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{x} - \mathbf{x}')} \int d\omega e^{-i\omega(t - t')} \\ &\sum_n \left[\frac{\langle \Psi_0 | a_k | \Psi_n \rangle \langle \Psi_n | a_k^+ | \Psi_0 \rangle}{\omega - (E_n - E_0)/\hbar + i\eta} + \frac{\langle \Psi_0 | a_k^+ | \Psi_n \rangle \langle \Psi_n | a_k | \Psi_0 \rangle}{\omega + (E_n - E_0)/\hbar - i\eta} \right] . \end{aligned} \quad (10.54)$$

Definisco la trasformata di Fourier

$$\begin{aligned} \tilde{G}(\mathbf{k}, \omega) &= \int d^3(x - x') e^{-i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{x} - \mathbf{x}')} \int d(t - t') e^{i\omega(t - t')} G(\mathbf{x}, t, \mathbf{x}', t') \\ &= \sum_n \left[\frac{\langle \Psi_0 | a_k | \Psi_n \rangle \langle \Psi_n | a_k^+ | \Psi_0 \rangle}{\omega - (E_n - E_0)/\hbar + i\eta} + \frac{\langle \Psi_0 | a_k^+ | \Psi_n \rangle \langle \Psi_n | a_k | \Psi_0 \rangle}{\omega + (E_n - E_0)/\hbar - i\eta} \right] . \end{aligned} \quad (10.55)$$

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.

$$\begin{aligned} \hbar\omega - E_n(N+1) + E_0(N) &= \hbar\omega - E_n(N+1) + E_0(N+1) - E_0(N+1) + E_0(N) \\ &= \hbar\omega - [E_n(N+1) - E_0(N+1)] - [E_0(N+1) - E_0(N)] = \hbar\omega - \hbar\omega_n(N+1) - \mu . \end{aligned}$$

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

$$\mu = \left(\frac{\partial E}{\partial N} \right)_V \equiv \left[\frac{E_0(N+1) - E_0(N)}{\Delta 1} \right] . \quad (10.56)$$

dove ho indicato con $\Delta 1$ la variazione di una unità del numero di fermioni. La funzione di Green in rappresentazione Lehmann è quindi

$$\tilde{G}(\mathbf{k}, \omega) = \sum_n \left[\frac{\langle \Psi_0 | a_k | \Psi_n \rangle \langle \Psi_n | a_k^\dagger | \Psi_0 \rangle}{\omega - \omega_n - \mu/\hbar + i\eta} + \frac{\langle \Psi_0 | a_k^\dagger | \Psi_n \rangle \langle \Psi_n | a_k | \Psi_0 \rangle}{\omega + \omega_n - \mu/\hbar - i\eta} \right] . \quad (10.57)$$

Il segno del potenziale chimico nel secondo denominatore è dovuto alla definizione (10.56) 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.

10.1.3 Interpretazione fisica

In rappresentazione di interazione, consideriamo uno stato ed aggiungiamo una particella nel punto \mathbf{x}' , al tempo t'

$$\psi_I^+(\mathbf{x}', t') |\Psi(t')\rangle . \quad (10.58)$$

Questo stato si propaga al tempo t come

$$U(t, t') \psi_I^+(\mathbf{x}', t') |\Psi_I(t')\rangle . \quad (10.59)$$

Cerchiamo la sua sovrapposizione con $\psi_I^+(\mathbf{x}, t) |\Psi_I(t)\rangle$ per $t > t'$. Ricordiamo alcune proprietà dell'operatore di propagazione $U(t, t')$

$$\begin{aligned} U(t, t') U(t', t) &= U(t, t) = 1 \\ |\Psi_H\rangle &= |\Psi_I(0)\rangle = U(0, -\infty) |\Phi_0\rangle = |\Psi_0\rangle \\ U(t, t_0) &= e^{\frac{i}{\hbar} H_0 t} e^{-\frac{i}{\hbar} (H_0 + H_1)(t-t_0)} e^{-\frac{i}{\hbar} H_0 t_0} \\ U(t, 0) &= e^{-\frac{i}{\hbar} H_1 t} ; \quad U(0, t) = e^{\frac{i}{\hbar} H_1 t} \\ \mathcal{O}_I(t) &= e^{-\frac{i}{\hbar} H_1 t} \mathcal{O}_H(t) e^{\frac{i}{\hbar} H_1 t} = U(t, 0) \mathcal{O}_H U(0, t) \\ \mathcal{O}_H(t) &= e^{\frac{i}{\hbar} H t} \mathcal{O}_S e^{-\frac{i}{\hbar} H t} ; \quad \mathcal{O}_I(t) = e^{\frac{i}{\hbar} H_0 t} \mathcal{O}_S e^{-\frac{i}{\hbar} H_0 t} \\ |\Psi_I(t')\rangle &= U(t', -\infty) |\Phi(0)\rangle . \end{aligned}$$

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 $t > t'$. La funzione di Green descrive l'ampiezza di probabilità che una particella creata nel punto \mathbf{x}' al tempo t' si trovi nel punto \mathbf{x} al tempo t .

10.2 Funzione di Green a due corpi

In questo paragrafo, per semplificare la scrittura, farò l'ipotesi $\langle \Psi_0 | \Psi_0 \rangle = 1$. La funzione di Green a due corpi è definita come

$$(-i)^2 G(\mathbf{x}_1, t_1, \mathbf{x}_2, t_2, \mathbf{x}_3, t_3, \mathbf{x}_4, t_4) \equiv \langle \Psi_0 | T[\psi_H(\mathbf{x}_1, t_1) \psi_H(\mathbf{x}_2, t_2) \psi_H^+(\mathbf{x}_3, t_3) \psi_H^+(\mathbf{x}_4, t_4)] | \Psi_0 \rangle , \quad (10.60)$$

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

$$G(1234) = -G(2134) = -G(1243) = G(2143) , \quad (10.61)$$

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

$$(-i)^2 G(\mathbf{x}_1, t_1, \mathbf{x}_2, t_2, \mathbf{x}_3, t_3, \mathbf{x}_4, t_4) \equiv \langle \Psi_0 | \psi_H(\mathbf{x}_1, t_1) \psi_H(\mathbf{x}_2, t_2) \psi_H^+(\mathbf{x}_3, t_3) \psi_H^+(\mathbf{x}_4, t_4) | \Psi_0 \rangle , \quad (10.62)$$

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

$$(-i)^2 G(\mathbf{x}_1, t_1, \mathbf{x}_2, t_2, \mathbf{x}_3, t_3, \mathbf{x}_4, t_4) \equiv \langle \Psi_0 | \psi_H^+(\mathbf{x}_3, t_3) \psi_H^+(\mathbf{x}_4, t_4) \psi_H(\mathbf{x}_1, t_1) \psi_H(\mathbf{x}_2, t_2) | \Psi_0 \rangle , \quad (10.63)$$

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

$$(-i)^2 G(\mathbf{x}_1, t_1, \mathbf{x}_2, t_2, \mathbf{x}_3, t_3, \mathbf{x}_4, t_4) = -\langle \Psi_0 | \psi_H(\mathbf{x}_1, t_1) \psi_H^+(\mathbf{x}_3, t_3) \psi_H(\mathbf{x}_2, t_2) \psi_H^+(\mathbf{x}_4, t_4) | \Psi_0 \rangle , \quad (10.64)$$

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

$$t_1 = t_3 = t' \quad \text{e} \quad t_2 = t_4 = t . \quad (10.65)$$

Per quest'ultimo caso riscriviamo la funzione di Green in termini di operatori di creazione e distruzione

$$\begin{aligned} G(\mathbf{x}_1, t, \mathbf{x}_2, t', \mathbf{x}_3, t, \mathbf{x}_4, t') &= \\ &= \sum_{\nu_1 \nu_2 \nu_3 \nu_4} \phi_{\nu_1}(\mathbf{x}_1) \phi_{\nu_3}^*(\mathbf{x}_3) \phi_{\nu_2}(\mathbf{x}_2) \phi_{\nu_4}^*(\mathbf{x}_4) \langle \Psi_0 | T[a_{\nu_1}(t') a_{\nu_3}^+(t') a_{\nu_2}(t) a_{\nu_4}^+(t)] | \Psi_0 \rangle \\ &= \sum_{\nu_1 \nu_2 \nu_3 \nu_4} \phi_{\nu_1}(\mathbf{x}_1) \phi_{\nu_2}(\mathbf{x}_2) \phi_{\nu_3}^*(\mathbf{x}_3) \phi_{\nu_4}^*(\mathbf{x}_4) G(\nu_1, t', \nu_2, t, \nu_3, t', \nu_4, t) . \end{aligned} \quad (10.66)$$

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 $t' > t$

$$\begin{aligned} G^R(\nu_1, t', \nu_2, t, \nu_3, t', \nu_4, t) &= \langle \Psi_0 | a_{\nu_1}(t') a_{\nu_3}^+(t') a_{\nu_2}(t) a_{\nu_4}^+(t) | \Psi_0 \rangle \\ &= \langle \Psi_0 | e^{\frac{i}{\hbar} H t'} a_{\nu_1} e^{-\frac{i}{\hbar} H t'} e^{\frac{i}{\hbar} H t'} a_{\nu_3}^+ e^{-\frac{i}{\hbar} H t'} e^{\frac{i}{\hbar} H t} a_{\nu_2} e^{-\frac{i}{\hbar} H t} e^{\frac{i}{\hbar} H t} a_{\nu_4}^+ e^{-\frac{i}{\hbar} H t} | \Psi_0 \rangle \\ &= \langle \Psi_0 | a_{\nu_1} a_{\nu_3}^+ e^{-\frac{i}{\hbar} (H - E_0)(t' - t)} a_{\nu_2} a_{\nu_4}^+ | \Psi_0 \rangle , \end{aligned} \quad (10.67)$$

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

$$G^A(\nu_1, t', \nu_2, t, \nu_3, t', \nu_4, t) = \langle \Psi_0 | a_{\nu_2} a_{\nu_4}^+ e^{+\frac{i}{\hbar} (H - E_0)(t' - t)} a_{\nu_1} a_{\nu_3}^+ | \Psi_0 \rangle \quad (10.68)$$

quindi si ha

$$G(\nu_1, \nu_2, \nu_3, \nu_4, \tau) = \begin{cases} G^A(\nu_1, t', \nu_2, t, \nu_3, t', \nu_4, t) & \text{per } \tau = t' - t < 0 \\ G^R(\nu_1, t', \nu_2, t, \nu_3, t', \nu_4, t) & \text{per } \tau = t' - t > 0 \end{cases} . \quad (10.69)$$

10.2.1 Rappresentazione di Lehmann

Definiamo la funzione di Green a due corpi dipendente dall'energia,

$$\tilde{G}(\nu_1, \nu_2, \nu_3, \nu_4, E) = \int_{-\infty}^{\infty} d\tau G(\nu_1, \nu_2, \nu_3, \nu_4, \tau) e^{\frac{i}{\hbar} E \tau} , \quad (10.70)$$

dove ho usato $\tau = t' - t$. Consideriamo la parte ritardata

$$\tilde{G}^R(\nu_1, \nu_2, \nu_3, \nu_4, E) = \langle \Psi_0 | a_{\nu_1} a_{\nu_3}^+ \int_0^{\infty} d\tau e^{-\frac{i}{\hbar} (H - E_0 - E)\tau} a_{\nu_2} a_{\nu_4}^+ | \Psi_0 \rangle . \quad (10.71)$$

Possiamo scrivere il valore dell'integrale sul tempo come

$$\lim_{\eta \rightarrow 0} \int_0^{\infty} d\tau e^{\frac{i}{\hbar} (-H + E_0 + E + i\eta)\tau} = \lim_{\eta \rightarrow 0} \frac{e^{\frac{i}{\hbar} (E - H + E_0)\tau} e^{-\eta\tau}}{\frac{i}{\hbar} (E - H + E_0 + i\eta)} \Big|_0^{\infty} = \lim_{\eta \rightarrow 0} \frac{i\hbar}{E - H + E_0 + i\eta} , \quad (10.72)$$

quindi

$$\tilde{G}^R(\nu_1, \nu_2, \nu_3, \nu_4, E) = \hbar \langle \Psi_0 | a_{\nu_1} a_{\nu_3}^+ \frac{i}{E - H + E_0 + i\eta} a_{\nu_2} a_{\nu_4}^+ | \Psi_0 \rangle . \quad (10.73)$$

Con un calcolo analogo otteniamo per la parte avanzata

$$\tilde{G}^A(\nu_1, \nu_2, \nu_3, \nu_4, E) = \langle \Psi_0 | a_{\nu_2} a_{\nu_4}^+ \int_{-\infty}^0 d\tau e^{\frac{i}{\hbar} (H - E_0 + E)\tau} a_{\nu_1} a_{\nu_3}^+ | \Psi_0 \rangle , \quad (10.74)$$

$$\lim_{\eta \rightarrow 0} \int_{-\infty}^0 d\tau e^{\frac{i}{\hbar} (H - E_0 + E - i\eta)\tau} = \lim_{\eta \rightarrow 0} \frac{e^{\frac{i}{\hbar} (E + H - E_0)\tau} e^{\eta\tau}}{\frac{i}{\hbar} (E + H - E_0 - i\eta)} \Big|_{-\infty}^0 = \lim_{\eta \rightarrow 0} \frac{-i\hbar}{E + H - E_0 - i\eta} , \quad (10.75)$$

$$\tilde{G}^A(\nu_1, \nu_2, \nu_3, \nu_4, E) = (-1) \hbar \langle \Psi_0 | a_{\nu_2} a_{\nu_4}^+ \frac{i}{E + H - E_0 - i\eta} a_{\nu_1} a_{\nu_3}^+ | \Psi_0 \rangle , \quad (10.76)$$

quindi

$$\begin{aligned} -\frac{i}{\hbar} \tilde{G}(\nu_1, \nu_2, \nu_3, \nu_4, E) &= -\frac{i}{\hbar} (\tilde{G}^R + \tilde{G}^A) = \langle \Psi_0 | a_{\nu_1} a_{\nu_3}^+ \frac{1}{E - H + E_0 + i\eta} a_{\nu_2} a_{\nu_4}^+ | \Psi_0 \rangle \\ &\quad - \langle \Psi_0 | a_{\nu_2} a_{\nu_4}^+ \frac{1}{E + H - E_0 - i\eta} a_{\nu_1} a_{\nu_3}^+ | \Psi_0 \rangle . \end{aligned} \quad (10.77)$$

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

$$-\frac{i}{\hbar}\tilde{G}(\nu_1, \nu_2, \nu_3, \nu_4, E) = \sum_n \left[\frac{\langle\Psi_0|a_{\nu_1}a_{\nu_3}^+|\Psi_n\rangle\langle\Psi_n|a_{\nu_2}a_{\nu_4}^+|\Psi_0\rangle}{E - (E_n - E_0) + i\eta} - \frac{\langle\Psi_0|a_{\nu_2}a_{\nu_4}^+|\Psi_n\rangle\langle\Psi_n|a_{\nu_1}a_{\nu_3}^+|\Psi_0\rangle}{E + (E_n - E_0) - i\eta} \right] . \quad (10.78)$$

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 A particelle.

10.3 Risposta lineare

Consideriamo la situazione in cui il sistema di molte particelle sia soggetto ad una perturbazione esterna. Scrivo l'hamiltoniana totale descrivente il sistema perturbato come somma dell'hamiltoniana H che descrive il sistema in assenza di perturbazione, ed indico con $|\Psi\rangle$ i suoi autostati. La perturbazione esterna è descritta dal termine $H^{\text{ext}}(t)$

$$H^{\text{tot}} = H + H^{\text{ext}}(t) , \quad (10.79)$$

dove abbiamo

$$H^{\text{ext}}(t) = BF(t) , \quad (10.80)$$

con $F(t) = 0$ per $t < t_0 = 0$. Questo significa che la perturbazione viene accesa dopo un tempo stabilito, che definisco come tempo zero. Supponiamo che 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:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\Psi_I(t)\rangle = B_I(t) |\Psi_I(t)\rangle , \quad (10.81)$$

dove

$$B_I(t) = e^{\frac{i}{\hbar}Ht} B e^{-\frac{i}{\hbar}Ht} \quad \text{e} \quad |\Psi_I(t)\rangle = e^{\frac{i}{\hbar}Ht} |\Psi(t)\rangle . \quad (10.82)$$

Nei calcoli di questo paragrafo utilizzo la convenzione che stati e operatori senza pedice sono in rappresentazione di Schrödinger. Integro l'equazione (10.81)

$$\begin{aligned} i\hbar \int_{-\infty}^t dt' \frac{\partial}{\partial t'} |\Psi_I(t')\rangle &= \int_{-\infty}^t dt' B_I(t') |\Psi_I(t')\rangle \\ i\hbar [|\Psi_I(t)\rangle - |\Psi_I(-\infty)\rangle] &= \int_{-\infty}^t dt' B_I(t') |\Psi_I(t')\rangle \\ |\Psi_I(t)\rangle &= |\Psi_I(-\infty)\rangle - \frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^t dt' B_I(t') |\Psi_I(t')\rangle . \end{aligned} \quad (10.83)$$

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 $|\Psi_I(-\infty)\rangle$

$$|\Psi_I(t)\rangle = |\Psi_0\rangle - \frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^t dt' B_I(t') |\Psi_0\rangle + \dots \quad (10.84)$$

Supponiamo che il sistema risponda con l'operatore D alla perturbazione. Il valore di aspettazione di questo operatore è dato da

$$\begin{aligned} & \langle \Psi_I(t) | D_I(t) | \Psi_I(t) \rangle \\ &= \left\{ \langle \Psi_0 | + \frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^t dt' B_I(t') \langle \Psi_0 | + \dots \right\} D_I(t) \left\{ | \Psi_0 \rangle - \frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^t dt' B_I(t') | \Psi_0 \rangle + \dots \right\} \\ &= \langle \Psi_0 | D_I(t) | \Psi_0 \rangle + \frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^t dt' \langle \Psi_0 | [B_I(t'), D_I(t)] | \Psi_0 \rangle + \dots \end{aligned} \quad (10.85)$$

Definisco la funzione risposta come

$$R(t' - t) = \begin{cases} 0 & \text{per } t' < t \\ \frac{i}{\hbar} \langle \Psi_0 | [B_I(t'), D_I(t)] | \Psi_0 \rangle & \text{per } t' > t \end{cases} , \quad (10.86)$$

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 $D_I(t)$,

$$B_I(t') = e^{\frac{i}{\hbar} H t'} B e^{-\frac{i}{\hbar} H t'} ; \quad D_I(t) = e^{\frac{i}{\hbar} H t} D e^{-\frac{i}{\hbar} H t} , \quad (10.87)$$

possiamo esprimere la risposta come

$$R(t' - t) = \frac{i}{\hbar} \langle \Psi_0 | B e^{\frac{i}{\hbar} (H - E_0)(t - t')} D | \Psi_0 \rangle - \frac{i}{\hbar} \langle \Psi_0 | D e^{-\frac{i}{\hbar} (H - E_0)(t - t')} B | \Psi_0 \rangle , \quad (10.88)$$

e, dato che dipende solo dalla differenza dei tempi $\tau = t - t'$, usando la definizione di trasformata di Fourier, otteniamo

$$\begin{aligned} R(E) &= \int_{-\infty}^{\infty} d\tau R(\tau) e^{\frac{i}{\hbar} E \tau} \\ &= \frac{i}{\hbar} \langle \Psi_0 | B \int_{-\infty}^{\infty} d\tau e^{\frac{i}{\hbar} (H - E_0 + E) \tau} D | \Psi_0 \rangle - \frac{i}{\hbar} \langle \Psi_0 | D \int_{-\infty}^{\infty} d\tau e^{-\frac{i}{\hbar} (H - E_0 - E) \tau} B | \Psi_0 \rangle \\ &= -\langle \Psi_0 | B (H - E_0 + E + i\eta)^{-1} D | \Psi_0 \rangle - \langle \Psi_0 | D (H - E_0 - E - i\eta)^{-1} B | \Psi_0 \rangle . \end{aligned} \quad (10.89)$$

Inserisco la completezza $\sum_n |\Psi_n\rangle \langle \Psi_n| = 1$

$$R(E) = \sum_n \left[\frac{\langle \Psi_0 | D | \Psi_n \rangle \langle \Psi_n | B | \Psi_0 \rangle}{E - (E_n - E_0) + i\eta} - \frac{\langle \Psi_0 | B | \Psi_n \rangle \langle \Psi_n | D | \Psi_0 \rangle}{E + (E_n - E_0) + i\eta} \right] . \quad (10.90)$$

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

$$\frac{1}{x' - x \pm i\eta} = P \frac{1}{x' - x} \mp i\pi \delta(x - x') , \quad (10.91)$$

dove P indica la parte principale, quindi

$$\delta(x - x') = -\frac{1}{\pi} \Im \left(\frac{1}{x' - x \pm i\eta} \right) , \quad (10.92)$$

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

$$S(E) = -\frac{1}{\pi} \Im(R(E)) = \sum_n |\langle \Psi_0 | B | \Psi_n \rangle|^2 \delta(E - (E_n - E_0)) . \quad (10.93)$$

Questa è l'espressione tradizionale che si ottiene applicando la teoria perturbativa dipendente dal tempo [Mes61]. Ipotizzando che B sia un operatore ad un corpo

$$B = \sum_{\nu_1 \nu_2} B_{\nu_1 \nu_2} a_{\nu_1}^+ a_{\nu_2} \quad \text{e} \quad B_{\nu_1 \nu_2} = \int d^3 r \phi_{\nu_1}^*(\mathbf{r}) B(\mathbf{r}) \phi_{\nu_2}(\mathbf{r}) , \quad (10.94)$$

otteniamo

$$R(E) = \sum_{\nu_1 \nu_2} \sum_{\nu_3 \nu_4} \sum_n \left[B_{\nu_1 \nu_2} B_{\nu_3 \nu_4}^* \frac{\langle \Psi_0 | a_{\nu_1} a_{\nu_2}^+ | \Psi_n \rangle \langle \Psi_n | a_{\nu_3} a_{\nu_4}^+ | \Psi_0 \rangle}{E - (E_n - E_0) + i\eta} - B_{\nu_3 \nu_4} B_{\nu_1 \nu_2}^* \frac{\langle \Psi_0 | a_{\nu_3} a_{\nu_4}^+ | \Psi_n \rangle \langle \Psi_n | a_{\nu_1} a_{\nu_2}^+ | \Psi_0 \rangle}{E + (E_n - E_0) + i\eta} \right] , \quad (10.95)$$

Poiché B è hermitiano, $B_{\nu_1 \nu_2} = B_{\nu_2 \nu_1}^*$ e gli indici ν sono muti, possiamo scrivere

$$\begin{aligned} R(E) &= \sum_{\nu_1 \nu_2} \sum_{\nu_3 \nu_4} B_{\nu_1 \nu_2} B_{\nu_3 \nu_4}^* \\ &\quad \sum_n \left[\frac{\langle \Psi_0 | a_{\nu_1} a_{\nu_2}^+ | \Psi_n \rangle \langle \Psi_n | a_{\nu_3} a_{\nu_4}^+ | \Psi_0 \rangle}{E - (E_n - E_0) + i\eta} - \frac{\langle \Psi_0 | a_{\nu_3} a_{\nu_4}^+ | \Psi_n \rangle \langle \Psi_n | a_{\nu_1} a_{\nu_2}^+ | \Psi_0 \rangle}{E + (E_n - E_0) + i\eta} \right] \\ &= \sum_{\nu_1 \nu_2} \sum_{\nu_3 \nu_4} B_{\nu_1 \nu_2} B_{\nu_3 \nu_4}^* (-i) \tilde{G}(\nu_1, \nu_3, \nu_2, \nu_4, E) , \end{aligned} \quad (10.96)$$

dove, nell'ultimo passaggio, è stata considerata l'espressione (10.78) della funzione di Green a due corpi in rappresentazione di Lehmann. La probabilità di transizione è data da

$$S(E) = -\frac{1}{\pi} \Im(R(E)) = \sum_{\nu_1 \nu_2} \sum_{\nu_3 \nu_4} B_{\nu_1 \nu_2} B_{\nu_3 \nu_4}^* \frac{\Im}{\pi} \left(i\hbar \tilde{G}(\nu_1, \nu_3, \nu_2, \nu_4, E) \right) . \quad (10.97)$$

10.4 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 .

$$\begin{aligned} H &= H_0 + H_1 = \int d^3 x \psi^+(\mathbf{x}) h(\mathbf{x}) \psi(\mathbf{x}) \\ &\quad + \frac{1}{2} \int d^3 x d^3 y \psi^+(\mathbf{x}) \psi^+(\mathbf{y}) V(\mathbf{x}, \mathbf{y}) \psi(\mathbf{y}) \psi(\mathbf{x}) , \end{aligned} \quad (10.98)$$

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 (10.19) e (10.22), ottengo

$$[\psi(\mathbf{r}), H_0] = h(\mathbf{r}) \psi(\mathbf{r}) \quad (10.99)$$

$$[\psi(\mathbf{r}), H_1] = \int d^3 x \psi^+(\mathbf{x}) V(\mathbf{r}, \mathbf{x}) \psi(\mathbf{x}) \psi(\mathbf{r}) \quad (10.100)$$

$$[\psi^+(\mathbf{r}), H_0] = -\psi^+(\mathbf{r}) h(\mathbf{r}) \quad (10.101)$$

$$[\psi^+(\mathbf{r}), H_1] = - \int d^3 x \psi^+(\mathbf{r}) \psi^+(\mathbf{x}) V(\mathbf{r}, \mathbf{x}) \psi(\mathbf{x}) \quad (10.102)$$

Dalla definizione di funzione di Green ad un corpo ottengo

$$\begin{aligned}
i \frac{\partial}{\partial t} G(\mathbf{x}, t, \mathbf{x}', t') &= \langle \Psi_0 | \psi_H(\mathbf{x}, t) \psi_H^+(\mathbf{x}', t') | \Psi_0 \rangle \frac{\partial \theta(t - t')}{\partial t} \\
&- \langle \Psi_0 | \psi_H^+(\mathbf{x}', t') \psi_H(\mathbf{x}, t) | \Psi_0 \rangle \frac{\partial \theta(t' - t)}{\partial t} \\
&+ \langle \Psi_0 | \frac{\partial \psi_H(\mathbf{x}, t)}{\partial t} \psi_H^+(\mathbf{x}', t') | \Psi_0 \rangle \theta(t - t') \\
&- \langle \Psi_0 | \psi_H^+(\mathbf{x}', t') \frac{\partial \psi_H(\mathbf{x}, t)}{\partial t} | \Psi_0 \rangle \theta(t' - t) .
\end{aligned}$$

Considerando le equazioni del moto in rappresentazione di Heisenberg

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi = [\psi, H] , \quad (10.103)$$

ottengo

$$\begin{aligned}
i \frac{\partial}{\partial t} G(\mathbf{x}, t, \mathbf{x}', t') &= \langle \Psi_0 | \psi_H(\mathbf{x}, t) \psi_H^+(\mathbf{x}', t') | \Psi_0 \rangle \delta(t - t') \\
&- \langle \Psi_0 | \psi_H^+(\mathbf{x}', t') \psi_H(\mathbf{x}, t) | \Psi_0 \rangle (-\delta(t - t')) \\
&+ (-i) \langle \Psi_0 | [\psi_H(\mathbf{x}, t), H] \psi_H^+(\mathbf{x}', t') | \Psi_0 \rangle \theta(t - t') \hbar^{-1} \\
&- (-i) \langle \Psi_0 | \psi_H^+(\mathbf{x}', t') [\psi_H(\mathbf{x}, t), H] | \Psi_0 \rangle \theta(t' - t) \hbar^{-1} .
\end{aligned}$$

Dai primi due termini si ottiene un anticommutatore tra ψ e ψ^+

$$\langle \Psi_0 | \psi_H(\mathbf{x}, t) \psi_H^+(\mathbf{x}', t') + \psi_H^+(\mathbf{x}', t') \psi_H(\mathbf{x}, t) | \Psi_0 \rangle = \langle \Psi_0 | \{ \psi_H(\mathbf{x}, t), \psi_H^+(\mathbf{x}', t') \} | \Psi_0 \rangle = \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}') . \quad (10.104)$$

Considerando le equazioni dei commutatori tra hamiltoniana e operatori di campo scritte in precedenza ottengo

$$\begin{aligned}
i \frac{\partial}{\partial t} G(\mathbf{x}, t, \mathbf{x}', t') &= \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \delta(t - t') + h(\mathbf{x}) \langle \Psi_0 | T [\psi_H(\mathbf{x}, t) \psi_H^+(\mathbf{x}', t')] | \Psi_0 \rangle (-i) \hbar^{-1} \\
&+ \langle \Psi_0 | T [[\psi_H(\mathbf{x}, t), H_1] \psi_H^+(\mathbf{x}', t')] | \Psi_0 \rangle (-i) \hbar^{-1} , \quad (10.105)
\end{aligned}$$

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

$$\left[i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - h(\mathbf{x}) \right] G(\mathbf{x}, t, \mathbf{x}', t') = \hbar \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \delta(t - t') - i \langle \Psi_0 | T [[\psi_H(\mathbf{x}, t), H_1] \psi_H^+(\mathbf{x}', t')] | \Psi_0 \rangle . \quad (10.106)$$

Per la (10.100) l'ultimo termine può essere scritto come

$$\begin{aligned}
&\langle \Psi_0 | T \left[\int d^3y \psi_H^+(\mathbf{y}, t) V(\mathbf{x}, \mathbf{y}) \psi_H(\mathbf{y}, t) \psi_H(\mathbf{x}, t) \psi_H^+(\mathbf{x}', t') \right] | \Psi_0 \rangle \\
&= \int d^3y V(\mathbf{x}, \mathbf{y}) \langle \Psi_0 | T [\psi_H(\mathbf{y}, t) \psi_H(\mathbf{x}, t) \psi_H^+(\mathbf{y}, t) \psi_H^+(\mathbf{x}', t')] | \Psi_0 \rangle \\
&= \int d^3y V(\mathbf{x}, \mathbf{y}) (i)^2 G(\mathbf{y}, t, \mathbf{x}, t, \mathbf{y}, t, \mathbf{x}', t') , \quad (10.107)
\end{aligned}$$

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

$$\left[i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - h(\mathbf{x}) \right] G(\mathbf{x}, t, \mathbf{x}', t') = \hbar \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \delta(t - t') + i \int d^3y V(\mathbf{x}, \mathbf{y}) G(\mathbf{y}, t, \mathbf{x}, t, \mathbf{y}, t, \mathbf{x}', t') . \quad (10.108)$$

Per un sistema imperturbato, $V(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = 0$ abbiamo

$$\left[i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - h(\mathbf{x}) \right] G^0(\mathbf{x}, t, \mathbf{x}', t') = \hbar \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \delta(t - t') . \quad (10.109)$$

Questa espressione mostra che, per un sistema imperturbato, la funzione di Green che abbiamo definito coincide con la risolvete dell'equazione di Schrödinger [Mes61].

L'espressione integrale delle equazioni del moto della funzione di Green è data dall'espressione

$$G(\mathbf{x}, t, \mathbf{x}', t') = G^0(\mathbf{x}, t, \mathbf{x}', t') + \frac{i}{\hbar} \int d^3y d^3z G^0(\mathbf{x}, t, \mathbf{y}, t) V(\mathbf{y}, \mathbf{z}) G(\mathbf{z}, t, \mathbf{y}, t, \mathbf{z}, t, \mathbf{x}', t') . \quad (10.110)$$

Si può inserire questa espressione nell'eq. (10.108) e, utilizzando la (10.109), verificare che viene soddisfatta.

L'equazione del moto per la per la funzione di Green ad un corpo contiene la funzione di Green a due corpi sia in forma differenziale (10.108) che integrale (10.110).

In generale, possiamo definire una funzione di Green a n corpi

$$\begin{aligned} & (i)^n G_n(\mathbf{x}_1, t_1, \dots, \mathbf{x}_n, t_n; \mathbf{x}'_1, t'_1, \dots, \mathbf{x}'_n, t'_n) \\ & \equiv \frac{\langle \Psi_0 | T [\psi_H(\mathbf{x}_1, t_1) \dots \psi_H(\mathbf{x}_n, t_n) \psi_H^\dagger(\mathbf{x}'_1, t'_1) \dots \psi_H^\dagger(\mathbf{x}'_n, t'_n)] | \Psi_0 \rangle}{\langle \Psi_0 | \Psi_0 \rangle} . \end{aligned} \quad (10.111)$$

L'equazione del moto per una funzione di Green a n corpi richiede l'informazione sulla funzione di Green a $n + 1$ corpi.

$$\begin{aligned} & \left[i\hbar \frac{\partial}{\partial t_1} - h(\mathbf{x}_1) \right] G_n(\mathbf{x}_1, t_1, \dots, \mathbf{x}_n, t_n; \mathbf{x}'_1, t'_1, \dots, \mathbf{x}'_n, t'_n) \\ & = \hbar \sum_{i=1}^n \delta(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_i) \delta(t_1 - t_i) (-1)^{n-i} G_{n-1}(\mathbf{x}_1, t_1, \dots, \mathbf{x}_{n-1}, t_{n-1}; \mathbf{x}'_1, t'_1, \dots, \mathbf{x}'_{n-1}, t'_{n-1}) \\ & + i \int d^3y V(\mathbf{x}, \mathbf{y}) G_{n+1}(\mathbf{x}_1, t_1, \dots, \mathbf{x}_{n+1}, t_{n+1}; \mathbf{x}'_1, t'_1, \dots, \mathbf{x}'_{n+1}, t'_{n+1}) . \end{aligned} \quad (10.112)$$

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 11.

Capitolo 11

Descrizione perturbativa della funzione di Green

La teoria perturbativa sviluppata nel Cap. 6 può essere utilizzata per il calcolo della funzione di Green. Considererò la funzione di Green ad un corpo.

Ricordo alcune relazioni presentate nel paragrafo 10.1.3.

$$U(t, 0) = e^{-\frac{i}{\hbar} H_1 t} ; U(0, t) = e^{\frac{i}{\hbar} H_1 t} \quad (11.1)$$

$$\mathcal{O}_H(t) = e^{\frac{i}{\hbar} H_1 t} \mathcal{O}_I(t) e^{-\frac{i}{\hbar} H_1 t} = U(0, t) \mathcal{O}_I U(t, 0) \quad (11.2)$$

$$|\Psi_H\rangle = |\Psi_I(0)\rangle = |\Psi_S(0)\rangle = U_\epsilon(0, -\infty)|\Phi_0\rangle = |\Psi_0\rangle . \quad (11.3)$$

Usando la tecnica dell'accensione adiabatica dell'interazione, presentata nel paragrafo 6.4, 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

$$\begin{aligned} U_\epsilon(+\infty, t) \mathcal{O}_I(t) U_\epsilon(t, -\infty) &= \\ \sum_{n=0}^{\infty} (-i)^n \frac{1}{n!} \int_t^{\infty} dt_1 \cdots \int_t^{\infty} dt_n e^{-\epsilon(|t_1| + \cdots + |t_n|)} T[H_{I,1}(t_1) \cdots H_{I,1}(t_n)] \mathcal{O}_I(t) \\ \sum_{m=0}^{\infty} (-i)^m \frac{1}{m!} \int_{-\infty}^t dt'_1 \cdots \int_{-\infty}^t dt'_m e^{-\epsilon(|t'_1| + \cdots + |t'_m|)} T[H_{I,1}(t'_1) \cdots H_{I,1}(t'_m)] , \end{aligned} \quad (11.4)$$

possiamo riscrivere la funzione di Green ad un corpo come

$$iG(x, y) = \sum_{\mu=0}^{\infty} (-i)^\mu \frac{1}{\mu!} \int_{-\infty}^{\infty} dt_1 \cdots \int_{-\infty}^{\infty} dt_\mu \frac{\langle \Phi_0 | T[H_{I,1}(t_1) \cdots H_{I,1}(t_\mu) \psi_I(x) \psi_I^+(y)] | \Phi_0 \rangle}{\langle \Phi_0 | U(+\infty, -\infty) | \Phi_0 \rangle} , \quad (11.5)$$

dove sono stati utilizzati i simboli $x \equiv (\mathbf{x}, t_x)$, ed analogamente per y . Nell'espressione precedente ho già effettuato il limite per $\epsilon \rightarrow 0$. Inoltre, ho considerato che H_1 è hermitiano, quindi l'espressione (11.4) è valida sia per $\mathcal{O}_I(t)$ sia per $\mathcal{O}_I^+(t)$.

Consideriamo un'interazione istantanea

$$\mathcal{U}(x, x') \equiv V(\mathbf{x}, \mathbf{x}')\delta(t - t') , \quad (11.6)$$

quindi il termine perturbativo dell'hamiltoniana può essere scritto come

$$H_{I,1}(t, t') = \frac{1}{2} \int d^3x \int d^3x' \psi_I^+(x) \psi_I^+(x') V(\mathbf{x}, \mathbf{x}') \delta(t - t') \psi_I(x') \psi_I(x) . \quad (11.7)$$

Il numeratore dell'equazione (11.5) può essere riscritto come

$$\begin{aligned} iG^{\text{num}}(x, y) &= \langle \Phi_0 | T [\psi_I(x) \psi_I^+(y)] | \Phi_0 \rangle \\ &+ (-i) \int_{-\infty}^{\infty} dt_1 \langle \Phi_0 | T [H_{I,1}(t_1) \psi_I(x) \psi_I^+(y)] | \Phi_0 \rangle + \dots , \end{aligned}$$

dove ho indicato con G^0 la funzione di Green ad un corpo del sistema di particelle non interagenti.

La presenza di $\delta(t_1 - t'_1)$ permette di inserire un integrale su t'_1 quindi posso scrivere

$$\begin{aligned} iG^{\text{num}}(x, y) &= iG^0(x, y) + (-i) \int_{-\infty}^{\infty} dt_1 \langle \Phi_0 | T \left[\frac{1}{2} \int d^3x_1 \int d^3x'_1 \psi_I^+(x_1) \psi_I^+(x'_1) \right. \\ &\quad \left. V(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}'_1) \delta(t_1 - t'_1) \psi_I(x'_1) \psi_I(x_1) \psi_I(x) \psi_I^+(y) \right] | \Phi_0 \rangle + \dots \\ &= iG^0(x, y) \\ &+ (-i) \frac{1}{2} \int d^4x_1 \int d^4x'_1 V(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}'_1) \delta(t_1 - t'_1) \\ &\quad \langle \Phi_0 | T [\psi_I^+(x_1) \psi_I^+(x'_1) \psi_I(x'_1) \psi_I(x_1) \psi_I(x) \psi_I^+(y)] | \Phi_0 \rangle + \dots . \end{aligned} \quad (11.8)$$

Il calcolo della funzione di Green in teoria perturbativa avviene utilizzando le tecniche presentate nel capitolo 6. 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. Nel caso specifico della rappresentazione di interazione abbiamo

$$a_{I,k}(t) = a_k e^{-i\omega_k t} ; \quad a_{I,k}^+(t) = a_k^+ e^{i\omega_k t} . \quad (11.9)$$

Gli operatori di campo sono definiti in termini di operatori di creazione e distruzione come

$$\psi_I^+(x) = \sum_k \phi_k^*(\mathbf{x}) a_{I,k}^+ ; \quad \psi_I(x) = \sum_k \phi_k(\mathbf{x}) a_{I,k} . \quad (11.10)$$

Posso esprimere le contrazioni come

$$\begin{aligned} \overline{\psi_I^+(x) \psi_I(y)} &= \sum_k \sum_{k'} \phi_k^*(\mathbf{x}) \phi_{k'}(\mathbf{y}) \overline{a_{I,k}^+(t_x) a_{I,k'}(t_y)} \\ &= \sum_k \sum_{k'} \phi_k^*(\mathbf{x}) e^{-i\omega_k t_x} \phi_{k'}(\mathbf{y}) e^{i\omega_{k'} t_y} \overline{a_k^+ a_{k'}} \\ &= \sum_k \sum_{k'} \phi_k^*(\mathbf{x}) e^{-i\omega_k t_x} \phi_{k'}(\mathbf{y}) e^{i\omega_{k'} t_y} \{T[a_k^+ a_{k'}] - N[a_k^+ a_{k'}]\} \\ &= T[\psi_I^+(x) \psi_I(y)] - N[\psi_I^+(x) \psi_I(y)] , \end{aligned}$$

quindi

$$\begin{aligned}
\overline{\psi_I(x)\psi_I^+(y)} &= \langle \Phi_0 | \psi_I(x)\psi_I^+(y) | \Phi_0 \rangle \\
&= \langle \Phi_0 | T[\psi_I(x)\psi_I^+(y)] | \Phi_0 \rangle - \langle \Phi_0 | N[\psi_I(x)\psi_I^+(y)] | \Phi_0 \rangle \\
&= \langle \Phi_0 | T[\psi_I(x)\psi_I^+(y)] | \Phi_0 \rangle = iG^0(x, y) .
\end{aligned} \tag{11.11}$$

Il calcolo della (11.8) 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.

11.1 Diagrammi di Goldstone-Feynmann

Considero lo sviluppo perturbativo (11.8) del numeratore della funzione di Green ad un corpo troncato al primo ordine

$$\begin{aligned}
iG^{(1),\text{num}}(x, y) &= iG^0(x, y) + \\
&(-i)\frac{1}{2} \int d^4x_1 \int d^4x'_1 \mathcal{U}(x_1, x'_1) \langle \Phi_0 | T[\psi_I^+(x_1)\psi_I^+(x'_1)\psi_I(x'_1)\psi_I(x_1)\psi_I(x)\psi_I^+(y)] | \Phi_0 \rangle .
\end{aligned}$$

Applico il teorema di Wick per calcolare l'elemento di matrice

$$\begin{aligned}
&\langle \Phi_0 | T[\psi_I^+(x_1)\psi_I^+(x'_1)\psi_I(x'_1)\psi_I(x_1)\psi_I(x)\psi_I^+(y)] | \Phi_0 \rangle \\
&= \langle \Phi_0 | \overbrace{\psi_I^+(x_1)\psi_I^+(x'_1)\psi_I(x'_1)\psi_I(x_1)} \overbrace{\psi_I(x)\psi_I^+(y)} | \Phi_0 \rangle \\
&+ \langle \Phi_0 | \overbrace{\psi_I^+(x_1)\psi_I^+(x'_1)\psi_I(x'_1)\psi_I(x_1)} \overbrace{\psi_I(x)\psi_I^+(y)} | \Phi_0 \rangle \\
&+ \langle \Phi_0 | \overbrace{\psi_I^+(x_1)\psi_I^+(x'_1)\psi_I(x'_1)\psi_I(x_1)} \overbrace{\psi_I(x)\psi_I^+(y)} | \Phi_0 \rangle \\
&+ \langle \Phi_0 | \overbrace{\psi_I^+(x_1)\psi_I^+(x'_1)\psi_I(x'_1)\psi_I(x_1)} \overbrace{\psi_I(x)\psi_I^+(y)} | \Phi_0 \rangle \\
&+ \langle \Phi_0 | \overbrace{\psi_I^+(x_1)\psi_I^+(x'_1)\psi_I(x'_1)\psi_I(x_1)} \overbrace{\psi_I(x)\psi_I^+(y)} | \Phi_0 \rangle \\
&+ \langle \Phi_0 | \overbrace{\psi_I^+(x_1)\psi_I^+(x'_1)\psi_I(x'_1)\psi_I(x_1)} \overbrace{\psi_I(x)\psi_I^+(y)} | \Phi_0 \rangle .
\end{aligned} \tag{11.12}$$

In termini di funzioni di Green non perturbata

$$\begin{aligned}
iG^{(1),\text{num}}(x, y) &= iG^0(x, y) + (-i)\frac{1}{2} \int d^4x_1 \int d^4x'_1 \mathcal{U}(x_1, x'_1) \\
&\left\{ \begin{aligned}
&[iG^0(x, y)][-iG^0(x_1, x_1)][-iG^0(x'_1, x'_1)] \\
&- [iG^0(x, y)][-iG^0(x_1, x'_1)][-iG^0(x'_1, x_1)] \\
&+ [-iG^0(x, x_1)][-iG^0(x_1, x'_1)][iG^0(x'_1, y)] \\
&- [-iG^0(x, x_1)][-iG^0(x'_1, x'_1)][iG^0(x_1, y)] \\
&+ [-iG^0(x, x'_1)][-iG^0(x'_1, x_1)][iG^0(x_1, y)] \\
&- [-iG^0(x, x'_1)][-iG^0(x_1, x_1)][iG^0(x'_1, y)]
\end{aligned} \right\} .
\end{aligned} \tag{11.13}$$

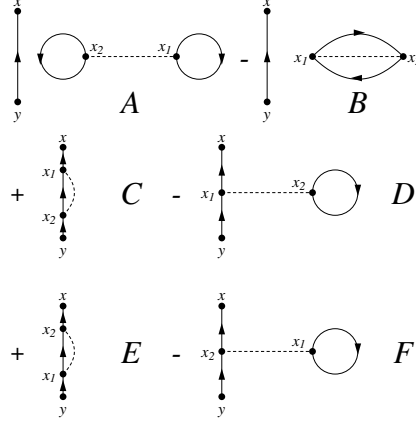


Figura 11.1:

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 (11.13) sono descritti dai diagrammi presentati nella figura 11.1.

I termini A e B della figura 11.1 sono sottounità composte da diagrammi non connessi. Il numeratore della funzione di Green può essere descritto come indica la figura 11.2, ovvero dal prodotto della somma di due diverse 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 .

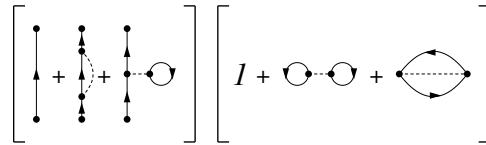


Figura 11.2:

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 .

I diagrammi topologicamente uguali, ad esempio C ed E della figura 11.1, 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 invarianza traslazionale 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.

$$G(x, y) = \frac{1}{(2\pi)^4} \int d^4k e^{ik \cdot (x-y)} \tilde{G}(\mathbf{k}, \omega) , \quad (11.14)$$

$$\tilde{G}(k) = \int d^4(x-y) e^{-ik \cdot (x-y)} G(x, y) . \quad (11.15)$$

dove abbiamo definito $d^4k \equiv d^3k d\omega$ 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

$$\mathcal{U}(x, y) = \frac{1}{(2\pi)^4} \int d^4k e^{-ik \cdot (x-y)} \tilde{\mathcal{U}}(k) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int d^3k e^{-i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{x}-\mathbf{y})} \tilde{V}(\mathbf{k}) \delta(t_x - t_y) . \quad (11.16)$$

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.

11.2 Equazione di Dyson e Autoenergia

L'espressione (11.5) 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 quando affermato è

$$G(x, y) = G^0(x, y) + \int d^4x_1 \int d^4x'_1 G^0(x, x_1) \bar{\Sigma}(x_1, x'_1) G^0(x'_1, y) . \quad (11.17)$$

espressione che definisce l'autoenergia (*self-energy*) $\bar{\Sigma}$.

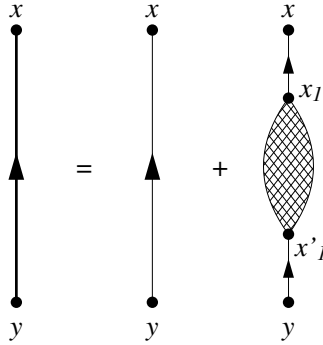


Figura 11.3: Rappresentazione grafica della definizione di autoenergia.

La rappresentazione grafica di questa espressione è data in figura 11.3. 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 $\bar{\Sigma}$.

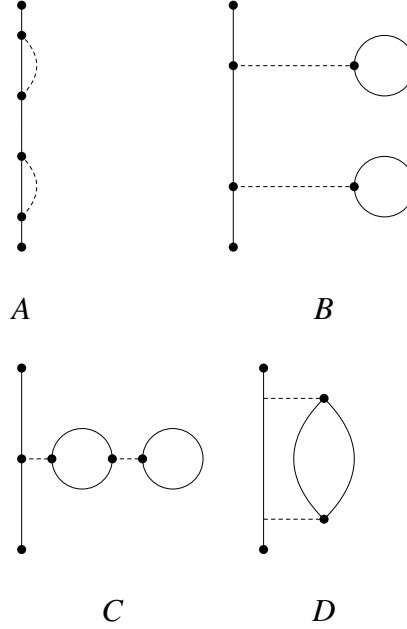


Figura 11.4: Gli inserimenti dei diagrammi A e B sono impropri, mentre C e D sono propri.

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 11.4, 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 11.5, 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

$$\begin{aligned} \bar{\Sigma}(x_1, x'_1) = & \Sigma(x_1, x'_1) + \int d^4 x_2 \int d^4 x'_2 \Sigma(x_1, x_2) G^0(x_2, x'_2) \Sigma(x'_2, x'_1) \\ & + \int d^4 x_2 \int d^4 x'_2 \int d^4 x_3 \int d^4 x'_3 \Sigma(x_1, x_2) G^0(x_2, x'_2) \Sigma(x'_2, x_3) G^0(x_3, x'_3) \Sigma(x'_3, x'_1) + \cdots \end{aligned}$$

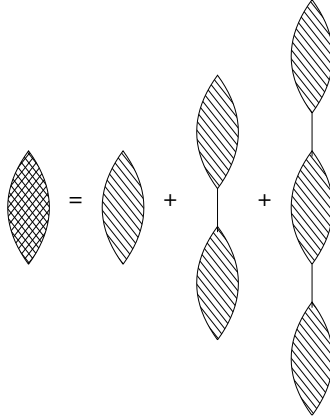


Figura 11.5: L'autoenergia impropria può essere riscritta come somma di termini di autoenergia propria.

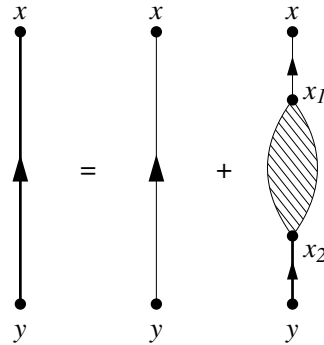


Figura 11.6: Rappresentazione grafica dell'equazione (11.19), di Dyson.

Inserendo questa definizione di autoenergia propria nella (11.17) abbiamo che

$$\begin{aligned}
 G(x, y) &= G^0(x, y) + \int d^4 x_1 \int d^4 x'_1 G^0(x, x_1) \Sigma(x_1, x'_1) G^0(x'_1, y) \\
 &+ \int d^4 x_1 \int d^4 x'_1 \int d^4 x_2 \int d^4 x'_2 G^0(x, x_1) \Sigma(x_1, x'_1) G^0(x'_1, x_2) \Sigma(x_2, x'_2) G^0(x'_2, y) \\
 &+ \dots
 \end{aligned} \tag{11.18}$$

Questa equazione può essere espressa come

$$G(x, y) = G^0(x, y) + \int d^4 x_1 \int d^4 x'_1 G^0(x, x_1) \Sigma(x_1, x'_1) G(x'_1, y) . \tag{11.19}$$

Questa espressione è comunemente chiamata **l'equazione di Dyson** e la sua rappresentazione grafica è data in figura 11.6. 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 11.4. Per questo diagramma, il primo ordine dello sviluppo contiene un solo loop, ed il diagramma completo è al secondo ordine.

L'equazione di Dyson assume un'espressione più semplice quando è riferita ad un sistema infinito ed omogeneo. In questo caso, possiamo definire

$$G(x, y) = \frac{1}{(2\pi)^4} \int d^4k e^{-ik \cdot (x-y)} \tilde{G}(k) \quad \text{e} \quad \Sigma(x, y) = \frac{1}{(2\pi)^4} \int d^4k e^{-ik \cdot (x-y)} \tilde{\Sigma}(k) . \quad (11.20)$$

Inserendo queste espressioni nell'equazione di Dyson (11.19), ed utilizzando la conservazione del quadripulso k ottengo

$$G(x, y) = \frac{1}{(2\pi)^4} \int d^4k e^{-ik \cdot (x-y)} \left[\tilde{G}^0(k) + \tilde{G}^0(k) \tilde{\Sigma}(k) \tilde{G}(k) \right] , \quad (11.21)$$

quindi l'espressione dell'equazione di Dyson nello spazio degli impulsi è

$$\tilde{G}(k) = \left[\tilde{G}^0(k) + \tilde{G}^0(k) \tilde{\Sigma}(k) \tilde{G}(k) \right] . \quad (11.22)$$

dalla quale

$$\tilde{G}(k) = \frac{\tilde{G}^0(k)}{1 - \tilde{G}^0(k) \tilde{\Sigma}(k)} = \frac{1}{[\tilde{G}^0(k)]^{-1} - \tilde{\Sigma}(k)} . \quad (11.23)$$

Poiché

$$\tilde{G}^0(\mathbf{k}, \omega) = \left[\frac{\Theta(k - k_F)}{\omega - \omega_k + i\eta} + \frac{\Theta(k_F - k)}{\omega - \omega_k - i\eta} \right] , \quad (11.24)$$

si ha

$$[\tilde{G}^0(k)]^{-1} = \omega - \omega_k , \quad (11.25)$$

quindi

$$\tilde{G}(k) = \frac{1}{\omega - \omega_k - \tilde{\Sigma}(k)} . \quad (11.26)$$

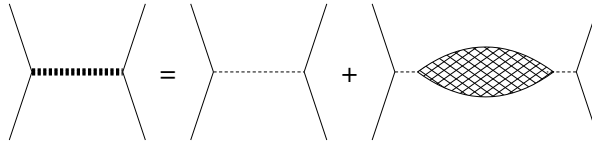


Figura 11.7:

In analogia a quanto fatto per ottenere l'equazione di Dyson, possiamo trattare l'interazione. La figura 11.7 indica come sia possibile considerare l'interazione tra due generiche linee di particella, o buca, definendo il polarizzatore $\tilde{\Pi}$

$$\mathcal{U}(x, y) = \mathcal{U}_0(x, y) + \int d^4x_1 \int d^4x'_1 \mathcal{U}_0(x, x_1) \tilde{\Pi}(x_1, x'_1) \mathcal{U}_0(x'_1, y) . \quad (11.27)$$

L'equazione precedente indica che l'interazione tra due particelle che si trovano nel mezzo è composta dall'interazione *nuda* \mathcal{U}_0 , ovvero l'interazione delle due particelle nel vuoto, più tutti i termini dovuti

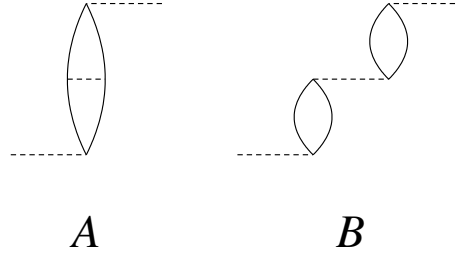


Figura 11.8:

alla polarizzazione del mezzo, che noi descriviamo in termini di eccitazioni virtuali particella-buca. Il polarizzatore improprio $\tilde{\Pi}$ rappresenta tutte queste eccitazioni.

Nella figura 11.8 sono rappresentati due dei possibili diagrammi inseriti nel polarizzatore improprio $\tilde{\Pi}$. Il diagramma A appartiene 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 Π come contenente solamente diagrammi propri

$$\begin{aligned}
 \bar{\Pi}(x_1, x'_1) &= \Pi(x_1, x'_1) + \int d^4x_2 \int d^4x'_2 \Pi(x_1, x_2) \mathcal{U}_0(x_2, x'_2) \Pi(x'_2, x'_1) \\
 &+ \int d^4x_2 \int d^4x'_2 \int d^4x_3 \int d^4x'_3 \Pi(x_1, x_2) \mathcal{U}_0(x_2, x'_2) \Pi(x'_2, x_3) \mathcal{U}_0(x_3, x'_3) \Pi(x'_3, x'_1) + \dots \\
 &= \Pi(x_1, x'_1) + \int d^4x_2 \int d^4x'_2 \Pi(x_1, x_2) \mathcal{U}_0(x_2, x'_2) \bar{\Pi}(x'_2, x'_1) .
 \end{aligned} \tag{11.28}$$

Quindi

$$\begin{aligned}
 \mathcal{U}(x, y) &= \mathcal{U}_0(x, y) + \int d^4x_1 \int d^4x'_1 \mathcal{U}_0(x, x_1) \Pi(x_1, x'_1) \mathcal{U}_0(x'_1, y) \\
 &+ \int d^4x_1 \int d^4x'_1 \int d^4x_2 \int d^4x'_2 \mathcal{U}_0(x, x_1) \Pi(x_1, x_2) \mathcal{U}_0(x_2, x'_2) \Pi(x'_2, x'_1) \mathcal{U}_0(x'_1, y) + \dots \\
 &= \mathcal{U}_0(x, y) + \int d^4x_1 \int d^4x'_1 \mathcal{U}_0(x, x_1) \Pi(x_1, x'_1) \mathcal{U}(x'_1, y) .
 \end{aligned} \tag{11.29}$$

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

$$\tilde{\mathcal{U}}(k) = \tilde{\mathcal{U}}_0(k) + \tilde{\mathcal{U}}_0(k) \tilde{\Pi}(k) \tilde{\mathcal{U}}_0(k) \tag{11.30}$$

$$\tilde{\mathcal{U}}(k) = \tilde{\mathcal{U}}_0(k) + \tilde{\mathcal{U}}_0(k) \tilde{\Pi}(k) \tilde{\mathcal{U}}(k) . \tag{11.31}$$

dalla quale si ottiene

$$\tilde{\mathcal{U}}(k) = \frac{\tilde{\mathcal{U}}_0(k)}{1 - \tilde{\mathcal{U}}_0(k) \tilde{\Pi}(k)} \equiv \frac{\tilde{\mathcal{U}}_0(k)}{\tilde{\mathcal{K}}(k)} \tag{11.32}$$

dove l'ultima equazione definisce \mathcal{K} la funzione dielettrica che modifica l'interazione nuda \mathcal{U}_0 per la presenza del mezzo.

11.3 Hartree - Fock

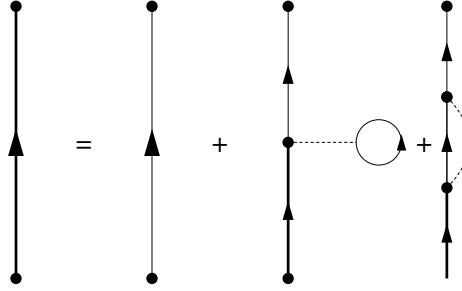


Figura 11.9: Primo ordine perturbativo della funzione di Green descritta in termini dell'equazione di Dyson.

Un primo approccio alla soluzione dell'equazione di Dyson (11.19) è quello di considerare al posto dell'autoenergia completa gli inserimenti con una sola linea di interazione. Diagrammaticamente questa approssimazione è descritta nella figura 11.9. Normalmente viene considerata un'approssimazione più

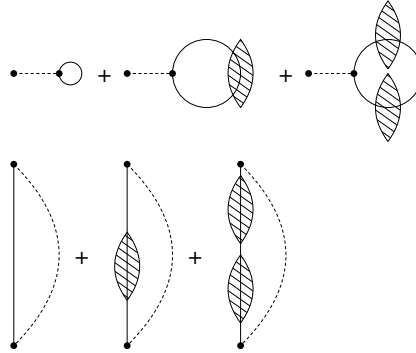


Figura 11.10: Inserimenti di autoenergia nei diagrammi della figura 11.9.

raffinata, consistente nell'inserire tutte le possibili iterazioni di autoenergia nelle funzioni di Green dei due termini di interazione della figura 11.9. Il risultato di questo inserimento di un numero infinito di autoenergie è presentato nella figura 11.11.

Consideriamo l'equazione di Dyson (11.19)

$$G(x, y) = G^0(x, y) + \int d^4 x_1 \int d^4 x'_1 G^0(x, x_1) \Sigma(x_1, x'_1) G(x'_1, y) .$$

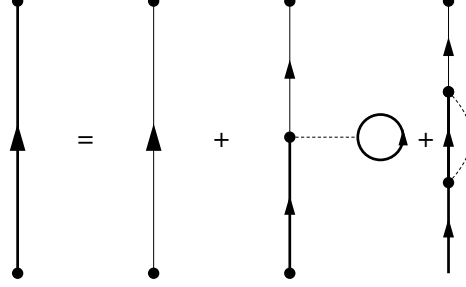


Figura 11.11: Rappresentazione diagrammatica dell'approssimazione HF nella equazione di Dyson.

Nell'approssimazione presentata dalla figura 11.9 si ha che l'autoenergia può essere espressa come

$$\hbar\Sigma^{(I)}(x_1, x'_1) = -i \left[\delta^4(x_1 - x'_1) \int d^4x_2 \mathcal{U}(x_1, x_2) G^0(x_2, x_2) - \mathcal{U}(x_1, x'_1) G^0(x_1, x'_1) \right] . \quad (11.33)$$

e nell'approssimazione della figura 11.11

$$\hbar\Sigma^{(II)}(x_1, x'_1) = -i \left[\delta^4(x_1 - x'_1) \int d^4x_2 \mathcal{U}(x_1, x_2) G(x_2, x_2) - \mathcal{U}(x_1, x'_1) G(x_1, x'_1) \right] . \quad (11.34)$$

L'approssimazione di Hartree-Fock non include diagrammi come quelli presentati in figura 11.12 .

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{U} può essere scritta come:

$$\mathcal{U}(x_1, x'_1) = V(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}'_1) \delta(t_1 - t'_1) .$$

Definiamo le trasformate di Fourier

$$G(\mathbf{x}t, \mathbf{x}'t') = \frac{1}{2\pi} \int d\omega e^{-i\omega(t-t')} \tilde{G}(\mathbf{x}, \mathbf{x}', \omega) , \quad (11.35)$$

$$G^0(\mathbf{x}t, \mathbf{x}'t') = \frac{1}{2\pi} \int d\omega e^{-i\omega(t-t')} \tilde{G}^0(\mathbf{x}, \mathbf{x}', \omega) , \quad (11.36)$$

$$\Sigma(\mathbf{x}t, \mathbf{x}'t') = \Sigma(\mathbf{x}, \mathbf{x}') \delta(t - t') = \frac{1}{2\pi} \int d\omega e^{-i\omega(t-t')} \Sigma(\mathbf{x}, \mathbf{x}') . \quad (11.37)$$

Per le funzioni di Green in rappresentazione mista, l'equazione di Dyson diventa

$$\tilde{G}(\mathbf{x}, \mathbf{y}, \omega) = \tilde{G}^0(\mathbf{x}, \mathbf{y}, \omega) + \int d^3x_1 \int d^3x'_1 \tilde{G}^0(\mathbf{x}, \mathbf{x}_1, \omega) \Sigma(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}'_1) \tilde{G}(\mathbf{x}'_1, \mathbf{y}, \omega) . \quad (11.38)$$

Nell'approssimazione II l'autoenergia diventa

$$\begin{aligned} \hbar\Sigma^{(II)}(x_1, x'_1) &= \hbar\Sigma^{(II)}(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}'_1) \delta(t_1 - t'_1) = -i\delta(t_1 - t'_1) \\ &\times \left[\delta^3(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}'_1) \int d^4x_2 V(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2) \frac{1}{2\pi} \int d\omega e^{-i\omega(t_2 - t_2^+)} \tilde{G}(\mathbf{x}_2, \mathbf{x}_2, \omega) \right. \\ &\left. - V(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}'_1) \frac{1}{2\pi} \int d\omega e^{-i\omega(t_1 - t_1^+)} \tilde{G}(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}'_1, \omega) \right] . \end{aligned} \quad (11.39)$$

Nell'equazione precedente ho indicato $t^+ > t$. Questo fatto sarà utilizzato per definire poi la funzione

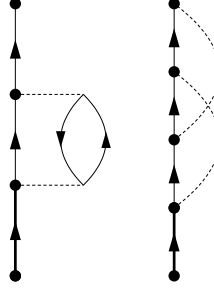


Figura 11.12: Esempio di diagrammi non inclusi nell'approssimazione di Hartree-Fock.

gradino.

Chiamiamo $\phi_j^0(\mathbf{r})$ le autofunzioni dell'hamiltoniana ad un corpo H_0

$$H_0 = \sum_j h_j \ ; \ h_j \phi_j^0(\mathbf{r}) = \left[-\frac{\nabla^2}{2m} + \mathcal{W}(\mathbf{r}) \right] \phi_j^0(\mathbf{r}) = \epsilon_j \phi_j^0(\mathbf{r}) \ . \quad (11.40)$$

dove ho indicato con $\mathcal{W}(\mathbf{r})$ il potenziale medio.

Usiamo questa base per descrivere gli operatori di campo in rappresentazione di interazione

$$\psi_I(\mathbf{x}, t) = \sum_k a_{I,k}(t) \phi_k^0(\mathbf{x}) \ ; \ \psi_I^+(\mathbf{x}, t) = \sum_k a_{I,k}^+(t) (\phi_k^0(\mathbf{x}))^* \ . \quad (11.41)$$

Quindi

$$\begin{aligned} iG^0(\mathbf{x}t, \mathbf{x}'t') &= \langle \Phi_0 | T [\psi_I(\mathbf{x}, t) \psi_I^+(\mathbf{x}', t')] | \Phi_0 \rangle \\ &= \langle \Phi_0 | \sum_k a_k e^{-i\omega_k t} \phi_k^0(\mathbf{x}) \sum_{k'} a_{k'}^+ e^{i\omega_{k'} t'} (\phi_{k'}^0(\mathbf{x}'))^* | \Phi_0 \rangle \Theta(t - t') \Theta(\omega_k - \epsilon_F) \\ &\quad - \langle \Phi_0 | \sum_{k'} a_{k'}^+ e^{i\omega_{k'} t'} (\phi_{k'}^0(\mathbf{x}'))^* \sum_k a_k e^{-i\omega_k t} \phi_k^0(\mathbf{x}) | \Phi_0 \rangle \Theta(t' - t) \Theta(\epsilon_F - \omega_k) \\ &= \sum_k \phi_k^0(\mathbf{x}) (\phi_k^0(\mathbf{x}'))^* e^{-i\omega_k(t-t')} [\Theta(t - t') \Theta(\omega_k - \epsilon_F) - \Theta(t' - t) \Theta(\epsilon_F - \omega_k)] \ , \end{aligned} \quad (11.42)$$

dove $\omega_k = \epsilon_k/\hbar$, e ho usato

$$\langle \Phi_0 | a_k a_{k'}^+ | \Phi_0 \rangle = \delta_{k'k} \Theta(\omega_k - \epsilon_F) \ ; \ \langle \Phi_0 | a_{k'}^+ a_k | \Phi_0 \rangle = \delta_{k'k} \Theta(\epsilon_F - \omega_k) \ . \quad (11.43)$$

Utilizzando la rappresentazione integrale di $\Theta(t - t')$, vedi l'equazione (10.44), ottengo

$$\tilde{G}^0(\mathbf{x}, \mathbf{x}', \omega) = \sum_k \phi_k^0(\mathbf{x}) \phi_k^{0,*}(\mathbf{x}') \left[\frac{\Theta(\epsilon_k - \epsilon_F)}{\omega - \omega_k + i\eta} + \frac{\Theta(\epsilon_F - \epsilon_k)}{\omega - \omega_k - i\eta} \right] \ . \quad (11.44)$$

Usando le ϕ^0 ottenute dalla (11.40) posso calcolare G^0 , con la quale si può attivare un ciclo iterativo usando l'equazione di Dyson (11.38) e l'equazione per l'autoenergia (11.39).

È possibile cercare per G un'espressione analoga alla (11.44) nella quale le ϕ^0 sono sostituite con generiche ϕ autostati di una nuova hamiltoniana ad un corpo, diversa da quella delle equazioni (11.40)

$$\tilde{G}(\mathbf{x}, \mathbf{x}', \omega) = \sum_k \phi_k(\mathbf{x}) \phi_k^*(\mathbf{x}') \left[\frac{\Theta(\epsilon_k - \epsilon_F)}{\omega - \omega_k + i\eta} + \frac{\Theta(\epsilon_k - \epsilon_F)}{\omega - \omega_k - i\eta} \right]. \quad (11.45)$$

Inserendo questa espressione nell'equazione (11.39) si incontrano integrali del tipo

$$\frac{1}{2\pi i} \int d\omega \frac{e^{i\omega|t-t^+|}}{\omega - \omega_k + i\eta} = 0; \quad \frac{1}{2\pi i} \int d\omega \frac{e^{i\omega|t-t^+|}}{\omega - \omega_k - i\eta} = \Theta(-|t-t^+|), \quad (11.46)$$

quindi ottengo l'espressione

$$\Sigma^{(II)}(x_1, x'_1) = \Sigma^{(II)}(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}'_1) \delta(t_1 - t'_1) \quad (11.47)$$

$$\begin{aligned} \hbar \Sigma^{(II)}(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}'_1) &= -i \left[\delta^3(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}'_1) \int d^3x_2 V(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2) i \sum_k \phi_k(\mathbf{x}_2) \phi_k^*(\mathbf{x}_2) \Theta(\epsilon_F - \epsilon_k) \right. \\ &\quad \left. - i V(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}'_1) \sum_k \phi_k(\mathbf{x}_1) \phi_k^*(\mathbf{x}'_1) \Theta(\epsilon_F - \epsilon_k) \right] \\ &= \delta^3(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}'_1) \int d^3x_2 V(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2) \rho(\mathbf{x}_2) - V(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}'_1) \sum_k \phi_k(\mathbf{x}_1) \phi_k^*(\mathbf{x}'_1) \Theta(\epsilon_F - \epsilon_k), \end{aligned} \quad (11.48)$$

dove ho usato l'espressione della densità per lo stato fondamentale di un sistema di particelle non interagenti

$$\rho(\mathbf{x}) = \sum_k^{\epsilon_F} \phi_k(\mathbf{x}_2) \phi_k^*(\mathbf{x}_2). \quad (11.49)$$

Definisco l'operatore

$$\mathcal{L} \equiv \hbar\omega - H_0 = \hbar\omega + \frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} - \mathcal{W}(\mathbf{x}). \quad (11.50)$$

dove \mathcal{W} è un potenziale medio ad un corpo.

$$\begin{aligned} \mathcal{L} \tilde{G}^0(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}'_1, \omega) &= \sum_k (\hbar\omega - \epsilon_k^0) \phi_k^0(\mathbf{x}_1) \phi_k^{0,*}(\mathbf{x}'_1) \left[\frac{\Theta(\epsilon_k^0 - \epsilon_F^0)}{\omega - \omega_k + i\eta} + \frac{\Theta(\epsilon_F^0 - \epsilon_k^0)}{\omega - \omega_k - i\eta} \right] \\ &= \hbar \sum_k \phi_k^0(\mathbf{x}_1) \phi_k^{0,*}(\mathbf{x}'_1) [\Theta(\epsilon_k^0 - \epsilon_F^0) + \Theta(\epsilon_F^0 - \epsilon_k^0)] = \hbar \delta^3(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}'_1), \end{aligned} \quad (11.51)$$

dove ho utilizzato la completezza delle ϕ^0 , ed il fatto che per definizione delle energie $\omega_k = \epsilon_k^0/\hbar$. L'espressione precedente indica che \mathcal{L} è l'operatore $(\tilde{G}^0)^{-1}$. Applico questo operatore all'equazione di Dyson

$$\begin{aligned} \mathcal{L} \tilde{G}(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}'_1, \omega) &= \mathcal{L} \tilde{G}^0(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}'_1, \omega) + \int d^3x_2 \int d^3x'_2 \mathcal{L} \tilde{G}^0(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \omega) \Sigma(\mathbf{x}_2, \mathbf{x}'_2) \tilde{G}(\mathbf{x}'_2, \mathbf{x}'_1, \omega) \\ &= \hbar \delta^3(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}'_1) + \int d^3x'_2 \Sigma(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}'_2) \tilde{G}(\mathbf{x}'_2, \mathbf{x}'_1, \omega). \end{aligned} \quad (11.52)$$

Esplicitando l'operatore \mathcal{L} ottengo

$$\begin{aligned} &\left[\hbar\omega + \frac{\hbar^2 \nabla_1^2}{2m} - \mathcal{W}(\mathbf{x}_1) \right] \sum_k \phi_k(\mathbf{x}_1) \phi_k^*(\mathbf{x}'_1) \left[\frac{\Theta(\epsilon_k - \epsilon_F)}{\omega - \omega_k + i\eta} + \frac{\Theta(\epsilon_F - \epsilon_k)}{\omega - \omega_k - i\eta} \right] \\ &= \hbar \delta^3(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}'_1) + \int d^3\mathbf{x}_2 \Sigma(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) \sum_k \phi_k(\mathbf{x}_2) \phi_k^*(\mathbf{x}'_1) \left[\frac{\Theta(\epsilon_k - \epsilon_F)}{\omega - \omega_k + i\eta} + \frac{\Theta(\epsilon_F - \epsilon_k)}{\omega - \omega_k - i\eta} \right]. \end{aligned} \quad (11.53)$$

Moltiplicando per $\phi_j(\mathbf{x}'_1)$ ed integrando su \mathbf{x}'_1 per l'ortonormalizzazione delle ϕ_k le somme scompaiono.

$$\begin{aligned} & \left[\hbar\omega + \frac{\hbar^2 \nabla_1^2}{2m} - \mathcal{W}(\mathbf{x}_1) \right] \phi_j(\mathbf{x}_1) \left[\frac{\Theta(\epsilon_j - \epsilon_F)}{\omega - \omega_j + i\eta} + \frac{\Theta(\epsilon_j - \epsilon_F)}{\omega - \omega_j - i\eta} \right] \\ &= \hbar\phi_j(\mathbf{x}_1) + \int d^3\mathbf{x}_2 \Sigma(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) \phi_j(\mathbf{x}_2) \left[\frac{\Theta(\epsilon_j - \epsilon_F)}{\omega - \omega_j + i\eta} + \frac{\Theta(\epsilon_F - \epsilon_j)}{\omega - \omega_j - i\eta} \right] . \end{aligned} \quad (11.54)$$

Moltiplicando per $\omega - \omega_j \equiv \omega - \epsilon_j/\hbar$ ottengo

$$\left[-\frac{\hbar^2 \nabla_1^2}{2m} + \mathcal{W}(\mathbf{x}_1) \right] \phi_j(\mathbf{x}_1) + \int d^3\mathbf{x}'_2 \Sigma(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}'_2) \phi_j(\mathbf{x}'_2) = \epsilon_j \phi_j(\mathbf{x}_1) , \quad (11.55)$$

ed inserendo la (11.48)

$$\begin{aligned} & \left[-\frac{\hbar^2 \nabla_1^2}{2m} + \mathcal{W}(\mathbf{x}_1) \right] \phi_j(\mathbf{x}_1) + \int d^3\mathbf{x}_2 V(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2) \rho(\mathbf{x}_2) \phi_j(\mathbf{x}_1) \\ & - \int d^3\mathbf{x}_2 V(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2) \sum_k \phi_k(\mathbf{x}_1) \phi_k^*(\mathbf{x}_2) \phi_j(\mathbf{x}_2) \Theta(\epsilon_F - \epsilon_k) = \epsilon_j \phi_j(\mathbf{x}_1) . \end{aligned} \quad (11.56)$$

che è la tradizionale espressione delle equazioni di Hartree-Fock.

11.4 Equazione di Bethe-Salpeter

Nel calcolo della funzione di Green con l'equazione di Dyson come indicato nella figura 11.13 ogni singolo termine della somma perturbativa rimane finito solo se il potenziale non tende mai all'infinito. In generale, la presenza di un core fortemente repulsivo nell'interazione tra due fermioni rende ogni termine della somma molto più grande del valore che si cerca. È lo stesso tipo di problema che abbiamo studiato nel Cap. 8 per l'energia del sistema, utilizzando la teoria di Brueckner.

Ogni linea sottile della figura 11.13 indica la funzione di Green G^0 , descrivibile in termini di funzioni d'onda non perturbate ϕ_k , come indicato dalle equazioni (11.44) e (11.45). Questo significa che ogni intersezione tra una linea tratteggiata ed una continua implica il prodotto $v\phi_k$ tra interazione nuda e funzione d'onda imperturbata. Come discusso nel Cap. 8 questo prodotto non è finito per potenziali che tendono all'infinito. Usando una strategia analoga a quella presentata nel Cap. 8 cerchiamo di costruire una interazione effettiva sommando una serie infinita di diagrammi in modo che il prodotto $v^{\text{eff}}\phi_k$ sia finito.

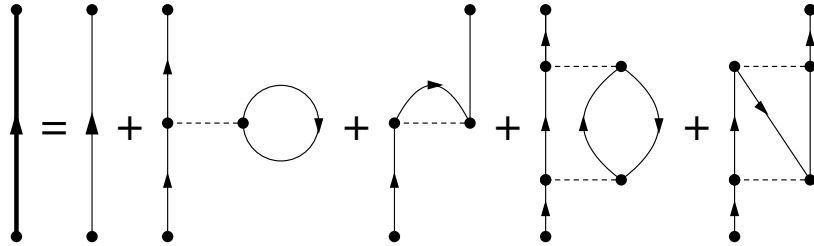


Figura 11.13:

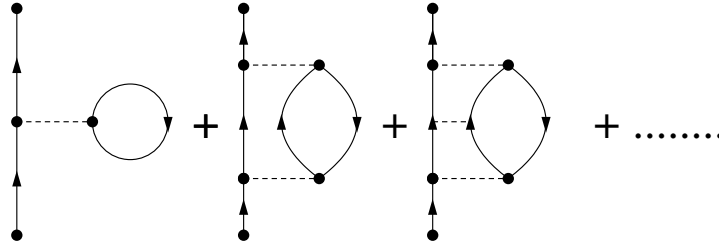


Figura 11.14:

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 11.14. Bisogna considerare che l'approssimazione *ladder* somma fino all'infinito termini di interazione legati esclusivamente a linee di particella. Questa restrizione alle sole linee di particella è necessaria perché nel processo di interazione la particella modifica il proprio stato. Se si trova al di sotto della superficie di Fermi lo stato finale è occupato da altri fermioni, quindi, per il principio di esclusione di Pauli, è inaccessibile.

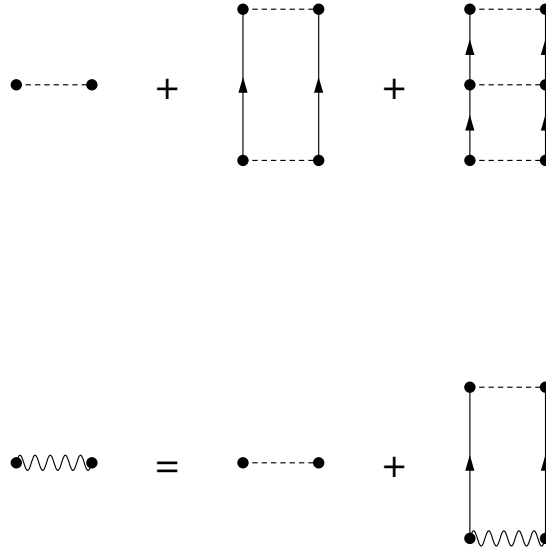


Figura 11.15:

Considero il termine di interazione tra due particelle come rappresentato dai diagrammi in alto nella figura 11.15, e lo indico con Σ_L dove con il pedice L caratterizzo l'approssimazione *ladder*. L'espressione dell'interazione può essere scritta come

$$\Sigma_L(x_1, x'_1) = \mathcal{U}(x_1, x'_1) + \mathcal{U}(x_1, x'_1) \int d^4x_2 \int d^4x'_2 G^0(x_1, x_2) \mathcal{U}(x_2, x'_2) G^0(x'_2, x'_1)$$

$$\begin{aligned}
& + \mathcal{U}(x_1, x'_1) \int d^4 x_2 \int d^4 x'_2 \int d^4 x_3 \int d^4 x'_3 \\
& \quad G^0(x_1, x_2) \mathcal{U}(x_2, x'_2) G^0(x_2, x_3) \mathcal{U}(x_3, x'_3) G^0(x'_3, x'_2) G^0(x'_2, x'_1) + \dots \\
& = \mathcal{U}(x_1, x'_1) \left\{ 1 + \int d^4 x_2 \int d^4 x'_2 G^0(x_1, x_2) \mathcal{U}(x_2, x'_2) \left[1 + \right. \right. \\
& \quad \left. \left. \int d^4 x_3 \int d^4 x'_3 G^0(x_2, x_3) \mathcal{U}(x_3, x'_3) (1 + \dots) G^0(x'_3, x'_2) \right] G^0(x'_2, x'_1) \right\} . \tag{11.57}
\end{aligned}$$

Come si può vedere l'espressione precedente itera lo stesso nocciolo di integrazione. Considerando tutti gli ordini dello sviluppo, ottengo l'espressione

$$\Sigma_L(x_1, x'_1) = \mathcal{U}(x_1, x'_1) \left[1 + \int d^4 x_2 \int d^4 x'_2 G^0(x_1, x_2) \Sigma_L(x_2, x'_2) G^0(x'_2, x'_1) \right] , \tag{11.58}$$

la cui rappresentazione grafica è data dalla seconda riga della figura 11.15. L'equazione (11.58) 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{U} e la funzione di Green non interagente G^0 . Questi termini sono però moltiplicati da Σ_L che rende finito l'integrando.

Ho espresso l'equazione di Bethe-Salpeter in termini di G^0 , ma è possibile utilizzare una G ottenuta dal calcolo Hartee-Fock.

11.5 La teoria Random Phase Approximation (RPA)

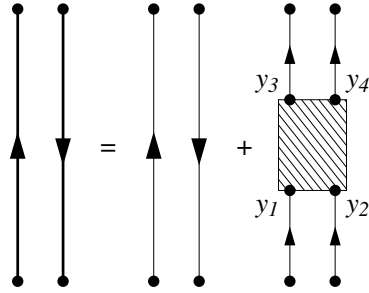


Figura 11.16: Rappresentazione grafica dell'equazione (11.59). La parte tratteggiata rappresenta il kernel $\bar{\mathcal{K}}$.

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:

$$G(x_1, x_2, x_3, x_4) = G^0(x_1, x_2, x_3, x_4) + \int d^4 y_1 d^4 y_2 d^4 y_3 d^4 y_4 G^0(x_1, x_2, y_1, y_2) \bar{\mathcal{K}}(y_1, y_2, y_3, y_4) G^0(y_3, y_4, x_3, x_4) , \quad (11.59)$$

dove il termine $\bar{\mathcal{K}}$ contiene tutti i diagrammi connessi che possono essere inseriti tra la linea di particella e quella di buca.

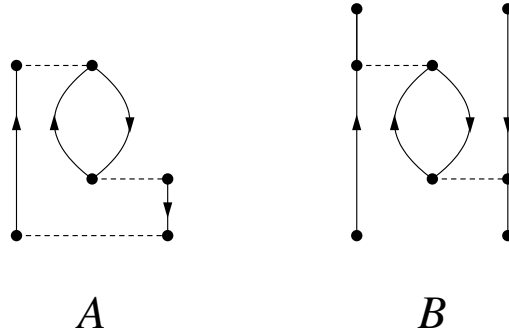


Figura 11.17: Il diagramma A è riducibile (improprio), mentre il diagramma B è irriducibile (proprio).

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 11.17. 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 (11.59) può essere, formalmente, riscritta come

$$G(x_1, x_2, x_3, x_4) = G^0(x_1, x_2, x_3, x_4) + \int d^4 y_1 d^4 y_2 d^4 y_3 d^4 y_4 G^0(x_1, x_2, y_1, y_2) \mathcal{K}(y_1, y_2, y_3, y_4) G(y_3, y_4, x_3, x_4) , \quad (11.60)$$

dove il kernel \mathcal{K} indica l'inserimento di tutti i diagrammi irriducibili.

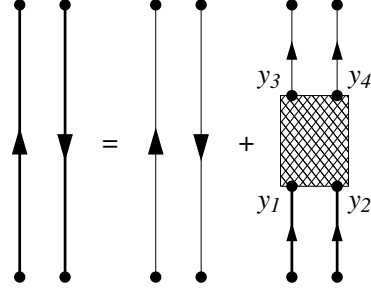


Figura 11.18: Rappresentazione grafica dell'equazione (11.60). La parte con il doppio tratteggio rappresenta il kernel proprio \mathcal{K} .

L'approssimazione Random Phase Approximation (RPA) consiste nel considerare, nell'equazione precedente, al posto del kernel K semplicemente l'interazione \mathcal{U} che dipende solo da due coordinate.

$$\mathcal{K}^{\text{RPA}}(y_1, y_2, y_3, y_4) = \mathcal{U}(y_1, y_4) [\delta(y_1 - y_2)\delta(y_3 - y_4) - \delta(y_1 - y_3)\delta(y_2 - y_4)] , \quad (11.61)$$

quindi

$$\begin{aligned} G^{\text{RPA}}(x_1, x_2, x_3, x_4) &= G^0(x_1, x_2, x_3, x_4) \\ &+ \int d^4 y_1 d^4 y_2 G^0(x_1, x_2, y_1, y_1) \mathcal{U}(y_1, y_2) G^{\text{RPA}}(y_2, y_2, x_3, x_4) \\ &- \int d^4 y_1 d^4 y_2 G^0(x_1, x_2, y_1, y_2) \mathcal{U}(y_1, y_2) G^{\text{RPA}}(y_1, y_2, x_3, x_4) , \end{aligned} \quad (11.62)$$

dove ho separato il termine diretto e di scambio. La rappresentazione grafica dei diagrammi presenti nell'approssimazione RPA è data nella figura 11.19.

Considero l'espressione della funzione di Green a due corpi in rappresentazione di Lehmann, Eq. (10.78). 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

$$G(x_1, x_2, x_3, x_4) = (2\pi)^{-8} \int d^4 k_1 d^4 k_2 e^{-ik_1(x_1-x_4)} e^{ik_2(x_2-x_3)} \tilde{G}(k_1, k_2) , \quad (11.63)$$

$$\mathcal{K}(x_1, x_2, x_3, x_4) = (2\pi)^{-8} \int d^4 k_1 d^4 k_2 e^{-ik_1(x_1-x_4)} e^{ik_2(x_2-x_3)} \tilde{\mathcal{K}}(k_1, k_2) . \quad (11.64)$$

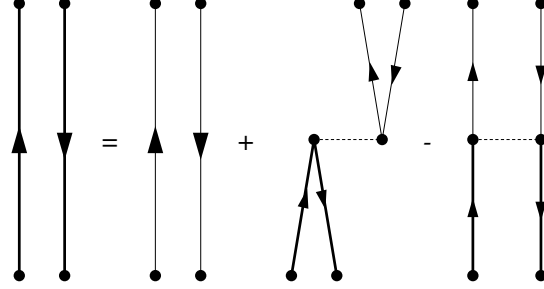


Figura 11.19:

Inserendo queste due definizioni nell'equazione (11.60) ed utilizzando l'ipotesi RPA (11.62) 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 (11.62), l'equazione assume un aspetto puramente algebrico

$$\tilde{G}^{\text{RPA,D}}(k_1, k_2) = \tilde{G}^0(k_1, k_2) + \tilde{G}^0(k_1, k_2) \tilde{\mathcal{U}}(k_1 - k_2 = q) \tilde{G}^{\text{RPA,D}}(k_1, k_2) . \quad (11.65)$$

Sviluppando un calcolo analogo per il termine di scambio, si vede che **non può essere fattorizzato** in una semplice espressione algebrica.

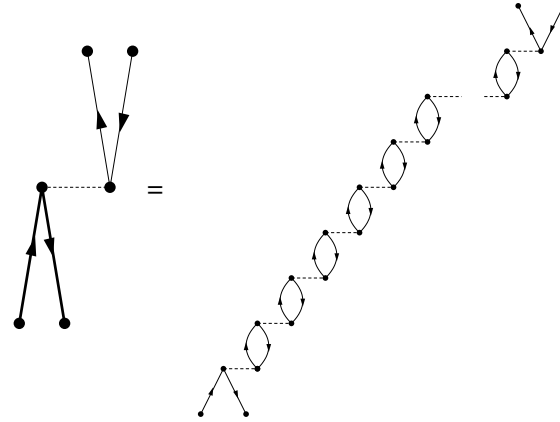


Figura 11.20: Rappresentazione grafica della RPA in approssimazione dei diagrammi ad anello.

Considerando quindi il solo termine diretto, approssimazione detta dei diagrammi ad anello (ring diagrams), si ha che

$$\tilde{G}^{\text{RPA,D}}(k_1, k_1 + q) = \tilde{G}^0(k_1, k_1 + q) + \tilde{G}^0(k_1, k_1 + q) \tilde{\mathcal{U}}(q) \tilde{G}^{\text{RPA,D}}(k_1, k_1 + q) \quad (11.66)$$

$$\tilde{G}^{\text{RPA,D}}(k_1, k_1 + q) \left[1 - \tilde{G}^0(k_1, k_1 + q) \tilde{\mathcal{U}}(q) \right] = \tilde{G}^0(k_1, k_1 + q) \quad (11.67)$$

$$\tilde{G}^{\text{RPA,D}}(k_1, k_1 + q) = \frac{\tilde{G}^0(k_1, k_1 + q)}{1 - \tilde{G}^0(k_1, k_1 + q) \tilde{\mathcal{U}}(q)} \quad (11.68)$$

Questa espressione è comunemente utilizzata per calcolare la risposta lineare in sistemi fermionici infiniti.

Parte IV

Teorie ispirate alla Meccanica Statistica

Capitolo 12

Teoria della base correlata (CBF)

12.1 Introduzione

Abbiamo visto nei capitoli precedenti che nella trattazione del problema a molti corpi, a causa del core fortemente repulsivo dell'interazione, non è possibile utilizzare ingenuamente le tecniche perturbative. I valori degli elementi di matrice dell'interazione V calcolati con le funzioni d'onda imperturbate ϕ delle particelle che interagiscono, divergerebbero, o comunque avrebbero valori molto grandi rispetto alle energie del sistema.

Nella parte III, utilizzando linguaggi e terminologie ispirate alla teoria dei campi, particelle, buche, funzioni di Green, ho mostrato come questo problema venga affrontato modificando l'interazione tra nucleoni che nel mezzo si trasforma in una interazione effettiva con un comportamento non divergente a piccole distanze. La teoria di Brueckner, capitolo 8, è un esempio di come produrre questo tipo di interazioni effettive. In questa teoria l'equazione fondamentale è la (8.2) che definisce l'interazione effettiva come

$$\mathcal{G}|\Phi_0\rangle = V|\Psi_0\rangle .$$

Un approccio alternativo alle teorie a molti corpi viene dalla Meccanica Statistica. In questo caso non ci si concentra sull'interazione, ma sulla funzione d'onda che descrive il moto relativo della coppia. La situazione è rappresentata nella figura 8.1, dove ϕ indica la funzione d'onda imperturbata la cui sovrapposizione con il potenziale produce grandi valori degli elementi di matrice. Moltiplicando ϕ per una funzione, detta di correlazione, che impedisca alle particelle interagenti di avvicinarsi troppo, si ottiene lo stesso risultato ottenuto con l'interazione effettiva (8.2).

Questa è l'idea base della Teoria della Base Correlata, CBF per *Correlated Basis Function*. Il linguaggio è completamente diverso da quello usato nella Parte III, qui non si parla di particelle buche ecc.: l'elemento essenziale di tutta la descrizione è la funzione di correlazione.

Il punto di partenza della teoria CBF è la ricerca di soluzioni dell'equazione di Schrödinger a molti corpi utilizzando il principio variazionale, si veda l'Appendice B. L'equazione da risolvere è

$$\delta E[\Psi_T] = \delta \frac{\langle \Psi_T | H | \Psi_T \rangle}{\langle \Psi_T | \Psi_T \rangle} = 0 , \quad (12.1)$$

dove H è l'hamiltoniana che descrive il sistema di particelle interagenti, e Ψ_T è una funzione d'onda a molti corpi di prova. Nel caso specifico della teoria CBF, la ricerca del minimo è fatta tra tutte le funzioni d'onda esprimibili come

$$\Psi_T(1, \dots, A) = F(1, \dots, A) \Phi(1, \dots, A) , \quad (12.2)$$

dove Φ è la funzione che descrive il sistema di particelle non interagenti. La funzione d'onda Φ è un determinante di Slater nel caso fermionico, ed il prodotto simmetrico di funzioni d'onda di singola particella, se il sistema è formato da bosoni.

La seconda ipotesi della teoria è che la funzione di correlazione a multicorpi F possa essere espressa come prodotto di funzioni d'onda di correlazione a due corpi

$$F(1, \dots, A) = \prod_{j>i=1}^A f(r_{ij}) , \quad (12.3)$$

dove $f(r_{ij})$ è una funzione della distanza tra le particelle del sistema.

Come si vede queste ipotesi sono analoghe a quelle adottate nell'approccio del Monte Carlo Variazionale, capitolo 4.2. La peculiarità della teoria consiste nella tecnica utilizzata per il calcolo del valore di aspettazione dell'hamiltoniana nell'Eq. (12.1). Questa tecnica è ispirata al metodo di sviluppo a *cluster* usato per descrivere i liquidi [May40]. Le particelle, correlate dalla funzione f , formano *cluster*. Uno studio dei vari *cluster* mostra che è possibile costruire un insieme di equazioni integrali che permettono di sommare in forma chiusa i contributi di tutti i diagrammi che hanno particolari proprietà topologiche. Questo insieme di equazioni integrali, chiamato hypernetted chain (HNC), catene iperconnesse, può essere usato per descrivere sistemi di liquidi bosonici oppure non quantistici. L'estensione a sistemi fermionici non è banale ed è stata formulata all'inizio degli anni '70 del secolo scorso [Fan74].

12.2 Bosoni

La comprensione delle idee che stanno alla base della teoria CBF e quindi come si ottengono le equazioni HNC, è semplificata nei sistemi bosonici che non devono considerare il principio di esclusione di Pauli. Descrivo un sistema di A bosoni, a spin nullo per maggiore semplicità, contenuti in un volume \mathcal{V} . Otterrò il limite termodinamico facendo tendere all'infinito sia A che \mathcal{V} , ma mantenendo costante la densità di particelle $\rho = A/\mathcal{V}$. Considero un sistema omogeneo con invarianza traslazionale, e, quindi, di densità costante. La funzione d'onda che descrive questo sistema può essere espressa come

$$\Phi(x_1, x_2, \dots, x_A) = \mathcal{S}(\phi_1(x_1) \cdots \phi_A(x_A)) , \quad (12.4)$$

dove ho indicato con \mathcal{S} un operatore che simmetrizza la funzione d'onda totale per lo scambio di due particelle. Nell'equazione precedente, ho indicato con $\phi_i(x_i)$ le funzioni d'onda di singola particella generate usando il modello a campo medio per invarianza traslazionale, e con x_i le coordinate generalizzate dell' i -esima particella, quindi, oltre alle coordinate spaziali, anche lo spin ed, eventualmente, l'isospin delle particelle considerate.

In questa descrizione di campo medio dello stato fondamentale del sistema, tutti i bosoni occupano lo stesso stato di singola particella con energia minima. Nel sistema che consideriamo, le funzioni di singola particella sono autostati dell'impulso \mathbf{k} , e possono essere espresse come:

$$\phi_j(x_j) = \frac{1}{\sqrt{\mathcal{V}}} e^{i\mathbf{k}_j \cdot \mathbf{r}_j} . \quad (12.5)$$

In questo caso la coordinata generalizzata x corrisponde a \mathbf{r} .

La densità del sistema può essere ottenuta usando le equazioni (12.4) e (12.5),

$$\rho_0(x) = A\phi^*(x)\phi(x) = \frac{A}{\mathcal{V}} = \rho . \quad (12.6)$$

che è costante, come atteso.

Come abbiamo già discusso, l'idea è quella di risolvere l'equazione di Schrödinger utilizzando il principio variazionale. Per fare questo utilizziamo una funzione d'onda di prova:

$$\Psi_T(x_1, \dots, x_A) = F(x_1, \dots, x_A) \Phi(x_1, \dots, x_A) , \quad (12.7)$$

dove, in questo caso, l'espressione di Φ è quella dell'equazione (12.4). Per il caso bosonico che stiamo studiando possiamo descrivere la funzione d'onda di correlazione a molti corpi $F(x_1, \dots, x_A)$ utilizzando l'ipotesi di Jastrow che esprime questa funzione di correlazione come prodotto di correlazioni, scalari, a due corpi $f(r_{ij})$ funzione della distanza tra le particelle i e j

$$F(x_1, \dots, x_A) = \prod_{j>i=1}^A f(r_{ij}) . \quad (12.8)$$

Nel calcolo del funzionale dell'energia

$$E[\Psi_T] = \frac{\langle \Psi_T | H | \Psi_T \rangle}{\langle \Psi_T | \Psi_T \rangle} , \quad (12.9)$$

è molto utile utilizzare la funzione di distribuzione a due corpi, che chiamerò TBDF per two-body distribution function, definita come :

$$g(x_1, x_2) = \frac{A(A-1) \int dx_3 \dots dx_A \Psi_T^*(x_1, x_2, \dots, x_A) \Psi_T(x_1, x_2, \dots, x_A)}{\rho^2 \int dx_1 dx_2 \dots dx_A \Psi_T^*(x_1, x_2, \dots, x_A) \Psi_T(x_1, x_2, \dots, x_A)} . \quad (12.10)$$

Il valore di aspettazione di ogni operatore a due corpi, ad esempio l'interazione a due corpi, è ottenuto integrando la TBDF sulle due coordinate x_1 e x_2 :

$$\langle O \rangle = \frac{1}{2} \rho^2 \int dx_1 dx_2 g(x_1, x_2) O(x_1, x_2) . \quad (12.11)$$

Il calcolo della TBDF permette di calcolare gli effetti dell'interazione a molti corpi indipendentemente dall'espressione esplicita dell'operatore.

Nel caso di un sistema bosonico abbiamo che

$$|\Phi|^2 = \prod_{i=1}^A \phi^*(x_i) \phi(x_i) = \frac{\rho_0(x_1)}{A} \frac{\rho_0(x_2)}{A} \dots \frac{\rho_0(x_A)}{A} = \frac{\rho^A}{A^A} \quad (12.12)$$

dove nell'ultima uguaglianza ho usato il fatto che il sistema è omogeneo.

Usando le equazioni (12.4), (12.5), (12.6) e le espressioni (12.7) e (12.8), il numeratore e il denominatore dell'equazione (12.10) possono essere scritti, rispettivamente, come

$$\mathcal{N} = (A-1) \frac{\rho^{A-2}}{A^{A-1}} \int dx_3 dx_4 \dots dx_A \prod_{i<j} f^2(r_{ij}) , \quad (12.13)$$

dove ho considerato anche il termine $1/\rho^2$, e

$$\mathcal{D} = \frac{\rho^A}{A^A} \int dx_1 dx_2 \dots dx_A \prod_{i<j} f^2(r_{ij}) . \quad (12.14)$$

Per effettuare lo sviluppo in *cluster* definisco una nuova funzione $h(r_{ij})$

$$f^2(r_{ij}) = 1 + h(r_{ij}) . \quad (12.15)$$

Otengo l'espressione

$$\prod_{i < j} f^2(r_{ij}) = \prod_{i < j} (1 + h(r_{ij})) = (1 + h(r_{12}))(1 + h(r_{13})) \cdots (1 + h(r_{23})) \cdots \quad (12.16)$$

Lo sviluppo in *cluster* consiste nel riunire i termini che hanno lo stesso numero di funzioni h

$$\prod_{i < j} f^2(r_{ij}) = 1 + \sum_{i < j}^A h(r_{ij}) + \sum_{i < j, k < l} h(r_{ij})h(r_{kl}) + \cdots \quad (12.17)$$

Consideriamo prima il denominatore \mathcal{D} , Eq. (12.14) che può essere scritto come

$$\begin{aligned} \mathcal{D} = \frac{\rho^A}{A^A} \int dx_1 dx_2 \dots dx_A & \left[1 + \sum_{i < j} h(r_{ij}) + 3 \sum_{i < j < k} h(r_{ik})h(r_{jk}) \right. \\ & \left. + \sum_{i < j < k < l} h(r_{ij})h(r_{kl}) + \dots \right]. \end{aligned} \quad (12.18)$$

Un modo conveniente per analizzare la struttura dei vari termini dell'equazione (12.17) è quello di utilizzare la rappresentazione grafica introdotta in Ref. [May40]. Nella rappresentazione grafica, i punti su cui si integra, detti *interni*, sono rappresentati da punti neri. Le funzioni h sono indicate da linee tratteggiate.

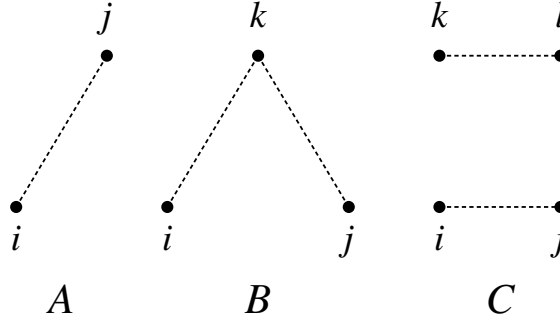


Figura 12.1: Rappresentazione grafica di alcuni termini che contribuiscono all'equazione (12.18). Le linee tratteggiate rappresentano la funzione di correlazione h , i punti neri, sono punti *interni* sui quali si integra.

La prima somma dell'equazione (12.18) è rappresentata dal diagramma A della figura 12.1. Una funzione di correlazione h che collega i punti i e j .

La seconda somma dell'equazione (12.18) è rappresentata dal diagramma B. In questo caso il punto k è in comune con le due funzioni h della somma. Il contributo totale di questa somma è:

$$\frac{1}{2} \frac{(A-1)(A-2)}{A^2} \rho^3 \int dx_i dx_j dx_k h(r_{ik})h(r_{jk}), \quad (12.19)$$

dove il fattore $(A-1)(A-2)$ è dovuto alla limitazione delle somme sugli indici i, j e k limitati a $i < k < j$.

La terza somma dell'equazione (12.18) contiene due funzioni h , come la seconda, ma queste funzioni coinvolgono quattro punti differenti. Il contributo di questo termine è rappresentato dal diagramma C della figura 12.1, ed è dato da:

$$\frac{A!}{4!(A-4)!} \frac{\rho^4}{A^4} \int dx_i dx_j dx_k dx_l h(r_{ij}) h(r_{kl}) . \quad (12.20)$$

È evidente che l'integrale di questa equazione è dato dal prodotto dell'integrale su x_i e x_j per l'integrale su x_k e x_l .

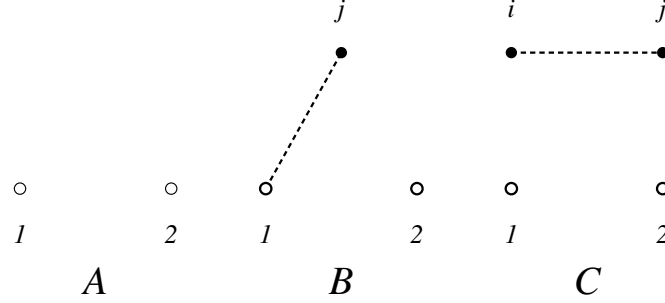


Figura 12.2: Rappresentazione grafica di alcuni termini che contribuiscono all'equazione (12.21).

Il numeratore, definito nell'equazione (12.13), non integra su due coordinate, che ho identificato con gli indici 1 e 2. Nel prodotto delle funzioni di correlazione, è conveniente fattorizzare il termine $f^2(r_{12})$ e lasciare all'interno dell'integrale termini che contengono le coordinate che saranno integrate. Usando lo sviluppo (12.15) ottengo l'espressione

$$\begin{aligned} \mathcal{N} = & f^2(r_{12}) \frac{(A-1)}{A} \left[1 + 2 \frac{\rho}{A} (A-2) \sum_{j>2} \int dx_j h(r_{1j}) \right. \\ & \left. + \frac{(A-2)(A-3)}{2} \frac{\rho^2}{A^2} \sum_{j>i>2} \int dx_i dx_j h(r_{ij}) + \dots \right] . \end{aligned} \quad (12.21)$$

Per descrivere il numeratore è necessario utilizzare un nuovo simbolo grafico. I punti *esterni*, cioè quelli sui quali non si effettua alcuna integrazione, sono indicati con punti bianchi, come mostrato nella figura 12.2, dove sono rappresentati i termini di ordine più basso dello sviluppo dell'equazione (12.21).

Il termine non correlato è rappresentato dal diagramma A. Esiste sempre una funzione $f^2(r_{12})$, ma questa non viene considerata nella rappresentazione grafica. Il diagramma B rappresenta la prima somma dell'equazione (12.21), dove la funzione h collega un punto esterno ed uno interno. Anche la seconda somma dell'equazione (12.21) contiene solo una singola funzione h , ma collega, in questo caso, solo punti interni. Il contributo di questa somma è rappresentato dal diagramma C della figura 12.2. I punti 1 e 2 sono interscambiabili e questo produce il fattore 2 nel secondo termine e, in generale, raddoppia il contributo di ogni tipo di diagramma.

Il numeratore ed il denominatore della TBDF (12.10) sono espressi dalle equazioni (12.18) e (12.21) come somma di termini caratterizzata dal numero di funzioni h , e da quello dei punti esterni ed interni. Ogni termine di queste somme forma un *cluster* di particelle, e può essere descritto da un diagramma.

Procedo facendo una classificazione topologica dei vari diagrammi. Come ho già messo in evidenza, il diagramma C della figura 12.1 può essere scritto fattorizzando i termini non connessi:

$$\frac{A!}{4!(A-4)!} \frac{\rho^4}{A^4} \int \int dr_i dr_j dr_k dr_l h(r_{ij}) h(r_{kl}) =$$

$$\frac{1}{4!} \left(1 - \frac{6}{A} + \frac{11}{A^2} - \frac{6}{A^3}\right) \rho^2 \int dr_i dr_j h(r_{ij}) \cdot \rho^2 \int dr_k dr_l h(r_{kl}) \quad .$$

Ogni diagramma che può essere fattorizzato in due o più parti indipendenti è detto non-connesso. Anche il diagramma C della figura 12.2 è non-connesso. I diagrammi che NON possono essere espressi come prodotti di parti indipendenti come il diagramma B della figura Fig. 12.1, sono detti connessi.

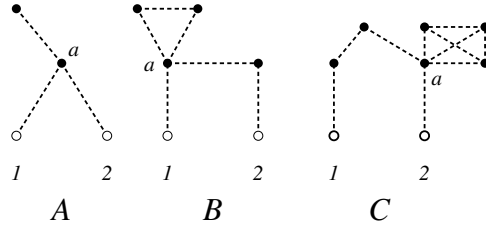


Figura 12.3: Esempi di diagrammi riducibili nel numeratore della TBDF, equazione (12.21).

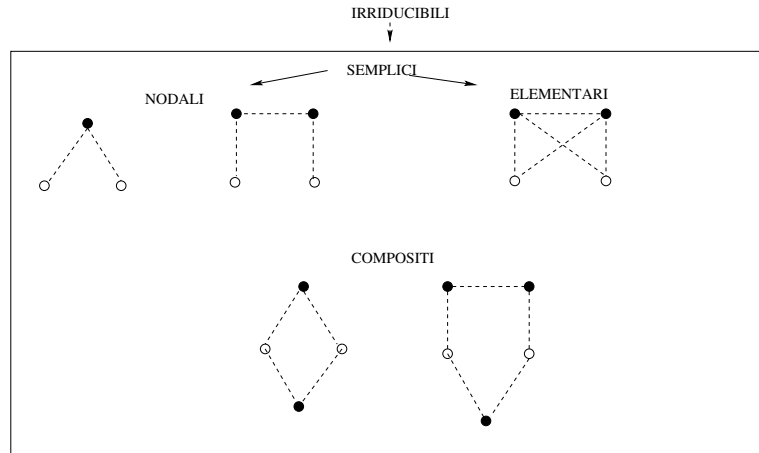


Figura 12.4: Esempio di diagrammi irriducibili, classificati come composti e semplici. Questi ultimi, a loro volta sono classificati come nodali ed elementari.

I diagrammi connessi della figura 12.3 hanno la proprietà di essere *riducibili*. Dal punto di vista grafico, i diagrammi riducibili sono caratterizzati dalla presenza di, almeno, un punto interno che collega

la parte del diagramma contenente i punti esterni con una parte che contiene solo punti interni. Per l'invarianza traslazionale del sistema, i contributi di queste due parti del diagramma sono fattorizzabili. In sistemi bosonici i diagrammi non-connessi e quelli riducibili possono essere espressi come prodotti di un termine contenente punti esterni per uno, o più, termini contenenti solo punti interni. La parte fattorizzata di questi diagrammi che non contiene punti esterni può essere semplificata, fino all'ordine $1/A$, dai diagrammi del denominatore. La prova rigorosa di questa proprietà è stata presentata a metà anni '70 del secolo scorso [Fan74].

Riassumendo la situazione: nell'espressione (12.10) della TBDF, i diagrammi del denominatore compensano il contributo dei diagrammi non-connessi e riducibili del numeratore. Per questo motivo, la TBDF può essere espressa come somma di diagrammi non-connessi e irriducibili che contengono i due punti esterni 1 e 2:

$$g(r_{12}) = f^2(r_{12}) \sum_{\text{tutti gli ordini}} Y_{irr}(r_{12}) = f^2(r_{12}) (1 + S(r_{12}) + C(r_{12})) . \quad (12.22)$$

L'invarianza traslazionale del sistema implica che la TBDF dipenda solo dalla distanza relativa dei due punti esterni r_{12} . Un'ulteriore classificazione topologica di questi diagrammi irriducibili li divide in semplici e composti che, nell'equazione (12.22) abbiamo indicato con $S(r_{12})$ and $C(r_{12})$.

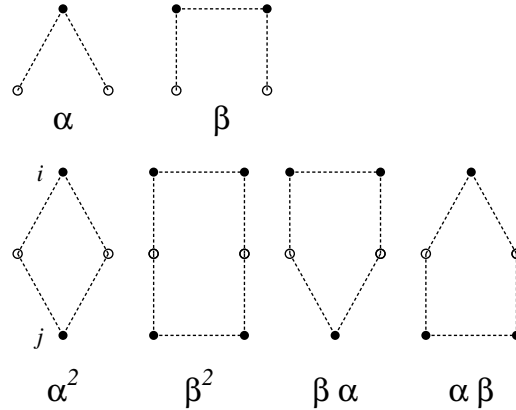


Figura 12.5: Esempio di formazione di diagrammi composti partendo da due diagrammi semplici.

I diagrammi composti sono formati da parti che sono connesse solo attraverso i due punti esterni 1 e 2, si veda la figura 12.4. Possono essere espressi in termini di diagrammi semplici. Poiché non c'è integrazione su punti esterni, il contributo di un diagramma composto è dato dal prodotto dei diagrammi semplici collegati ai punti esterni.

Chiamiamo con $S^2(r_{12})$ il contributo dato dalla somma di tutti i diagrammi composti formati da due diagrammi semplici, come sono, ad esempio, i diagrammi composti della Fig. 12.4. Poiché lo scambio di tutte le particelle di un sottodiagramma con quelle dell'altro produce lo stesso diagramma composto, dobbiamo moltiplicare $S^2(r_{12})$ per un fattore $1/2$. Nel riquadro indico come emerge questo fattore $1/2$ considerando i diagrammi della figura (12.5).

Supponiamo di costruire diagrammi compositi con i due diagrammi α e β della figura 12.5. Il contributo dei diagrammi ottenuti iterando due volte i diagrammi α e β è dato da $(\alpha + \beta)^2 = \alpha^2 + \beta^2 + 2\alpha\beta$. I diagrammi α^2 e β^2 hanno simmetria $1/2$. Nel calcolo del numeratore (12.21) bisogna inserire questo fattore perché scambiando gli indici i e j si ottiene lo stesso contributo. D'altra parte le somme dell'espressione (12.21) sono limitate con $j > i$ e questo implica che solo uno dei due termini topologicamente identici appaia. Stesso discorso per il diagramma β^2 . Ad esempio l'espressione per α^2 è

$$\sum_{i>j} \int dx_i h(r_{1i}) h(r_{i2}) \int dx_j h(r_{1j}) h(r_{j2}) = \frac{1}{2} \sum_{i,j} \int dx_i h(r_{1i}) h(r_{i2}) \int dx_j h(r_{1j}) h(r_{j2}) .$$

Anche la somma degli ultimi due diagrammi deve essere moltiplicata per $1/2$ dato che i limiti sulle somme implicano che solo uno dei due diagrammi possa contribuire.

Questo discorso può essere ripetuto per ogni diagramma composito formato da due qualsiasi diagrammi semplici.

La stessa procedura può essere utilizzata per i diagrammi compositi costruiti da n diagrammi semplici e si può dimostrare che ogni contributo $S^n(r_{12})$ deve essere moltiplicato per un fattore $1/n!$. Per questo motivo, la somma totale dei diagrammi compositi può essere espressa in termini di diagrammi semplici come

$$C(r_{12}) = \frac{S^2(r_{12})}{2!} + \frac{S^3(r_{12})}{3!} + \frac{S^4(r_{12})}{4!} + \dots \quad (12.23)$$

La TBDF, (12.22), può essere riscritta come

$$\begin{aligned} g(r_{12}) &= f^2(r_{12}) \left[1 + S(r_{12}) + \frac{S^2(r_{12})}{2!} + \frac{S^3(r_{12})}{3!} + \dots \right] \\ &= f^2(r_{12}) \exp[S(r_{12})] , \end{aligned} \quad (12.24)$$

dove l'ultima uguaglianza appare perché il sistema ha un numero infinito di particelle.

L'equazione precedente esprime la TBDF solo in termini di diagrammi semplici, che, a loro volta possono essere classificati come nodali o elementari. Questi ultimi in letteratura sono anche indicati come *bridge diagrams*, ma io userò solo l'aggettivo elementari.

In un diagramma nodale c'è almeno un punto dove passano tutti i percorsi che vanno da un punto esterno all'altro. Questi punti sono detti nodi. Diagrammi che non hanno nodi sono detti elementari. Alcuni esempi di diagrammi nodali ed elementari sono presentati nella figura 12.4.

Chiamo N il contributo di tutti i diagrammi nodali, ed E quello degli elementari. Posso esprimere la TBDF come:

$$g(r_{12}) = f^2(r_{12}) \exp[N(r_{12}) + E(r_{12})] \quad (12.25)$$

$$\begin{aligned} &= [1 + h(r_{12})] [1 + N(r_{12}) + E(r_{12}) + \dots] \\ &= 1 + N(r_{12}) + X(r_{12}) . \end{aligned} \quad (12.26)$$

Questa equazione definisce i diagrammi contenuti in $X(r_{12})$, che sono normalmente chiamati non-nodali perché non hanno nodi.

Un diagramma nodale può essere considerato come composto da parti che sono collegate nel punto nodale. Per questo motivo, ogni diagramma nodale può essere ottenuto integrando le due funzioni che rappresentano le parti del diagramma. Consideriamo, ad esempio, il diagramma nodale della figura 12.6 che ha i e j come punti esterni e k come nodo. Se chiamiamo $a(r_{ik})$ e $b(r_{kj})$ le due funzioni che descrivono le due parti del diagramma, il contributo di questo diagramma alla TBDF (12.22) è:

$$\int d\mathbf{r}_k a(r_{ik}) b(r_{kj}) \rho(r_k) = \rho \int d\mathbf{r}_k a(r_{ik}) b(r_{kj}) \equiv \left(a(r_{ik}) \middle| \rho(\mathbf{r}_k) b(r_{kj}) \right) , \quad (12.27)$$

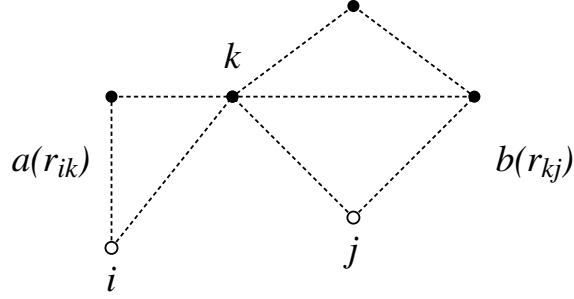


Figura 12.6: Esempio di diagramma nodale. Indichiamo con $a(r_{ik})$ il contributo della parte del diagramma a sinistra del punto nodale k , e con $b(r_{kj})$ il contributo della parte destra.

dove una funzione densità $\rho(\mathbf{r}_k)$ è stata associata al punto di integrazione \mathbf{r}_k per recuperare la corretta normalizzazione, e, poiché nel sistema che sto considerando la densità è costante, è stata fattorizzata fuori dall'integrale. L'ultimo termine definisce il simbolo $\left(\left| \right. \right)$ che ho usato per indicare il prodotto di convoluzione.

Utilizzando le considerazioni precedenti, possiamo scrivere un'espressione chiusa che ci premette il calcolo di tutti i diagrammi nodali. Il contributo globale $N(r_{ij})$ di tutti i diagrammi nodali tra i punti i e j , può essere ottenuto come prodotto di convoluzione nel nodo \mathbf{r}_k di tutti i diagrammi irriducibili che possono essere costruiti tra i e k e tra k e j :

$$N(r_{ij}) = \left(X(r_{ik}) \left| \rho(\mathbf{r}_k) [N(r_{kj}) + X(r_{kj})] \right. \right). \quad (12.28)$$

Ogni diagramma nodale ha almeno un nodo, e ogni percorso tra i punti esterni i e j deve passare attraverso tutti i nodi. L'equazione precedente indica che la parte del diagramma tra i e il primo nodo k , che è un diagramma non-nodale, deve essere integrata con una convoluzione con i) il diagramma non-nodale che produce in questo caso un diagramma nodale con un solo nodo ii) un diagramma nodale producendo un diagramma con più di un nodo. La convoluzione di $N(r_{ik})$ con $N(r_{kj})$ produce un diagramma già contenuto in $N(r_{ij})$ quindi non è considerata.

Il gruppo di equazioni (12.25), (12.26) e (12.28) sono conosciute come equazioni HyperNetted Chain (HNC), di catene iperconnesse. L'equazione (12.25) permette di esprimere la TBDF in termini di diagrammi semplici dopo aver sommato, in forma chiusa, i diagrammi composti e l'equazione (12.28) permette il calcolo del contributo di tutti i diagrammi nodali. Tuttavia non c'è un'espressione chiusa per calcolare i diagrammi elementari che devono essere calcolati uno alla volta. I calcoli della TBDM senza il contributo dei diagrammi elementari sono chiamati HNC/0. Quando il contributo del primo diagramma elementare è incluso nel calcolo della TBDF è chiamato HNC/4, poiché questo diagramma, mostrato nella figura 12.4, coinvolge quattro particelle.

Le equazioni HNC sono normalmente risolte con una procedura iterativa partendo dall'ipotesi $N(r_{12}) = E(r_{12}) = 0$, che implica $X(r_{12}) = f^2(r_{12}) - 1$. Partendo da questa ipotesi, si possono ottenere i nuovi diagrammi nodali usando l'equazione (12.28).

Le equazioni HNC permettono di calcolare la TBDF che viene usata per ottenere il valore dell'energia (12.9) usando l'hamiltoniana

$$H = - \sum_{i=1}^A \frac{\hbar^2}{2m} \nabla_i^2 + \sum_{i < j=1}^A V_{ij} + \sum_{i < j < k=1}^A V_{ijk}. \quad (12.29)$$

Il valore di aspettazione dell'energia viene calcolato usando la funzione d'onda di prova:

$$\Psi_T(1, \dots, A) = F(1, \dots, A)\Phi(1, \dots, A) = \mathcal{S}\left(\prod_{i < j} F_{ij}\right)\Phi(1, \dots, A) . \quad (12.30)$$

Il calcolo del contributo del termine a due corpi del potenziale V_{ij} è immediato, come indicato dall'equazione (12.11). Più complicato il calcolo del contributo dell'energia cinetica, che però è affrontato con tecniche ben consolidate. Il termine di energia cinetica viene separato in tre parti

$$\langle T \rangle \equiv T_\phi + T_F - T_{c.m.} , \quad (12.31)$$

dove ho definito un termine in cui le derivate agiscono sulla funzione d'onda di campo medio Φ

$$T_\phi \equiv -\frac{\hbar^2}{4m} \left(\langle \Phi^* F^2 \sum_{i=1}^A \nabla_i^2 \Phi \rangle - \langle \sum_{i=1}^A (\nabla_i \Phi^*) \cdot F^2 \nabla_i \Phi \rangle \right) , \quad (12.32)$$

un termine nel quale le derivate agiscono sulla correlazione

$$T_F \equiv -\frac{\hbar^2}{4m} \langle \Phi^* \left[F \left(\sum_{i=1}^A \nabla_i^2 F \right) - \sum_{i=1}^A (\nabla_i F)^2 \right] \Phi \rangle , \quad (12.33)$$

ed un ultimo termine che fornisce il contributo del centro di massa:

$$T_{c.m.} = -\frac{\hbar^2}{2mA} \langle \Psi_T^* \left(\sum_{i=1}^A \nabla_i \right)^2 \Psi_T \rangle . \quad (12.34)$$

Nelle equazioni precedenti, il simbolo $\langle \rangle$ indica

$$\langle X \rangle = \frac{\int dx_1, \dots, dx_A X(x_1, \dots, x_A)}{\langle \Psi_T | \Psi_T \rangle} . \quad (12.35)$$

Il termine T_F è trattato in maniera analoga al termine a due corpi dell'interazione V_{ij} e inserito nell'equazione (12.11). Il calcolo degli altri pezzi è tecnicamente più complicato, ma non presenta particolari problemi.

12.3 Fermioni

Nella descrizione di un sistema fermionico è necessario considerare il principio di esclusione di Pauli. L'estensione della teoria HNC al sistema fermionico è detta Fermi Hypernetted Chain (FHNC).

Nel caso di un sistema fermionico, la funzione d'onda di campo medio Φ (12.7) è un determinante di Slater di funzioni d'onda di singola particella. Per un sistema infinito, le funzioni d'onda di singola particella possono essere espresse come:

$$\phi_a(x_j) = \frac{1}{\sqrt{\mathcal{V}}} e^{i\mathbf{k}_a \cdot \mathbf{r}_j} \chi_{s_a}(j) \chi_{t_a}(j) , \quad (12.36)$$

dove ho indicato con s e t le terze componenti dello spin e dell'isospin e con χ_s e χ_t gli spinori di Pauli. Nel caso fermionico, le coordinate generalizzate x indicano la posizione \mathbf{r} e le terze componenti di spin e isospin.

Nell'espressione della TBDF appare il modulo quadro della funzione d'onda non correlata. È quindi importante presentare qualche proprietà di $|\Phi|^2$ che può anche essere espresso come:

$$|\Phi(1, 2, \dots, A)|^2 = \begin{vmatrix} \rho_0(x_1, x_1) & \rho_0(x_1, x_2) & \dots & \rho_0(x_1, x_A) \\ \rho_0(x_2, x_1) & \rho_0(x_2, x_2) & \dots & \rho_0(x_2, x_A) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \rho_0(x_A, x_1) & \rho_0(x_A, x_2) & \dots & \rho_0(x_A, x_A) \end{vmatrix}, \quad (12.37)$$

dove gli elementi del determinante dell'espressione precedente sono stati definiti come:

$$\rho_0(x_i, x_j) = \sum_a \phi_a^*(x_i) \phi_a(x_j). \quad (12.38)$$

La somma viene effettuata su tutti gli stati di singola particella occupati, quindi per lo stato fondamentale su tutti gli stati al di sotto della superficie di Fermi.

Nell'equazione (12.38) ho definito la matrice densità ad un corpo (OBDM) non correlata, che è l'ingrediente fondamentale per il calcolo della TBDF nei sistemi fermionici. Una proprietà fondamentale della OBDM, dovuta all'ortonormalità delle funzioni di singola particella, è:

$$\int dx_j \rho_0(x_i, x_j) \rho_0(x_j, x_k) = \rho_0(x_i, x_k), \quad (12.39)$$

dove ho indicato con il segno di integrale sia l'integrazione sulla coordinata spaziale, sia la somma sulle terze componenti di spin e isospin, cioè la loro traccia.

Definiamo i sottodeterminanti come:

$$\Delta_p(1, \dots, p) = \begin{vmatrix} \rho_0(x_1, x_1) & \rho_0(x_1, x_2) & \dots & \rho_0(x_1, x_p) \\ \rho_0(x_2, x_1) & \rho_0(x_2, x_2) & \dots & \rho_0(x_2, x_p) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \rho_0(x_p, x_1) & \rho_0(x_p, x_2) & \dots & \rho_0(x_p, x_p) \end{vmatrix} \quad p \leq A. \quad (12.40)$$

Per la proprietà (12.39) della OBDM non correlata, i sub-determinanti hanno la seguente proprietà:

$$\int dx_{p+1} \Delta_{p+1}(1, \dots, p+1) = (A-p) \Delta_p(1, \dots, p), \quad (12.41)$$

e, per iterazione, si ha:

$$\int dx_{p+1} \dots dx_A \Delta_A(1, \dots, A) = (A-p)! \Delta_p(1, \dots, p). \quad (12.42)$$

Questo implica che:

$$\Delta_p = 0, \quad p > A. \quad (12.43)$$

La proprietà (12.43) è estremamente utile nella applicazione delle tecniche di sviluppo a cluster in sistemi fermionici finiti.

Come esempio mostro esplicitamente queste proprietà per Δ_3 .

$$\Delta_3(1, 2, 3) = \begin{vmatrix} \rho_0(x_1, x_1) & \rho_0(x_1, x_2) & \rho_0(x_1, x_3) \\ \rho_0(x_2, x_1) & \rho_0(x_2, x_2) & \rho_0(x_2, x_3) \\ \rho_0(x_3, x_1) & \rho_0(x_3, x_2) & \rho_0(x_3, x_3) \end{vmatrix}$$

$$\begin{aligned}
&= \rho(x_1, x_1) \begin{vmatrix} \rho_0(x_2, x_2) & \rho_0(x_2, x_3) \\ \rho_0(x_3, x_2) & \rho_0(x_3, x_3) \end{vmatrix} \\
&- \rho(x_1, x_2) \begin{vmatrix} \rho_0(x_2, x_1) & \rho_0(x_2, x_3) \\ \rho_0(x_3, x_1) & \rho_0(x_3, x_3) \end{vmatrix} \\
&+ \rho(x_1, x_3) \begin{vmatrix} \rho_0(x_2, x_1) & \rho_0(x_2, x_2) \\ \rho_0(x_3, x_1) & \rho_0(x_3, x_2) \end{vmatrix}.
\end{aligned}$$

Per la normalizzazione delle densità ad un corpo e la proprietà (12.39) ottengo

$$\begin{aligned}
\int d^3r_3 \Delta_3(1, 2, 3) &= \rho(x_1, x_1)\rho(x_2, x_2)A - \rho(x_1, x_1)\rho(x_1, x_2) \\
&- \rho(x_1, x_2)\rho(x_2, x_1)A + \rho(x_1, x_2)\rho(x_2, x_1) \\
&+ \rho(x_2, x_1)\rho(x_1, x_2) - \rho(x_1, x_1)\rho(x_2, x_2) \\
&= (A - 1)\rho(x_1, x_1)\rho(x_2, x_2) - (A - 1)\rho(x_2, x_1)\rho(x_1, x_2) \\
&= (A - 1) \begin{vmatrix} \rho_0(x_1, x_1) & \rho_0(x_1, x_2) \\ \rho_0(x_2, x_1) & \rho_0(x_2, x_2) \end{vmatrix}
\end{aligned}$$

Le proprietà della OBDM e dei sotto-determinanti che ho appena presentato dipendono solo dall'ortonormalità delle funzioni d'onda di singola particella e non dalla loro espressione. Per questo motivo sono valide sia per sistemi infiniti che per sistemi finiti.

L'espressione (12.36) delle funzioni d'onda di singola particella è stata scelta per descrivere un sistema omogeneo ed infinito di fermioni. In questo caso, la OBDM non correlata assume l'espressione:

$$\rho_0(x_i, x_j) = \frac{\rho}{\nu} \ell(k_F r_{ij}) \sum_{s,t} \chi_s^+(i) \chi_t^+(i) \chi_s(j) \chi_t(j). \quad (12.44)$$

Nell'espressione precedente ho indicato con ν il fattore di degenerazione introdotto dai termini di spin-isospin, 4 nel caso di materia nucleare, 2 nel gas di elettroni, e con $k_F = (6\pi^2\rho/\nu)^{1/3}$ il momento di Fermi. La funzione $\ell(x)$, detta di Slater, ha la seguente espressione:

$$\ell(x) = \frac{3}{x^3} (\sin x - x \cos x). \quad (12.45)$$

Anche nel caso fermionico lo sviluppo a cluster viene analizzato in termini diagrammatici. È evidente la necessità di inserire un nuovo simbolo grafico che prenda in considerazione che le particelle del sistema sono correlate non solo dalla funzione $h(r_{ij})$, che chiamerò correlazione dinamica, ma anche dal principio di esclusione di Pauli, la cui correlazione sarà denominata statistica. Quest'ultimo fatto è inserito nella OBDM non correlata $\rho_0(x_i, x_j)$ che, nel calcolo della TBDF, forma circuiti chiusi e non sovrapponibili. Il simbolo utilizzato è una linea orientata che collega i punti x_i e x_j . In un sistema infinito bisogna associare un termine $-\ell(k_F r_{ij})/\nu$ ad ogni linea statistica che lega i punti i e j , ed un fattore $-\nu$ per ogni circuito statistico legato alla traccia sugli spin e gli isospin.

Come nel caso bosonico non c'è alcun limite al numero di linee di correlazione dinamica che possono raggiungere un singolo punto. Diversamente, il principio di esclusione di Pauli implica che un punto può essere raggiunto da due linee, oppure da nessuna. Solo i punti esterni hanno la possibilità di essere raggiunti da una singola linea di correlazione statistica. In questo caso i diagrammi assumono il nome di *cc*, come indicato nella figura 12.8.

Usando la funzione d'onda di prova (12.7) con l'ipotesi di Jastrow (12.8) e la definizione (12.15) della funzione h possiamo scrivere la TBDF (12.10) come:

$$g(x_1, x_2)$$

$$= \frac{A(A-1) \int dx_3 \dots dx_A (1 + \sum_{i < j} h_{ij} + \sum_{i < j < k} h_{ij} h_{jk} + \dots) |\Phi(x_1, \dots, x_A)|^2}{\rho^2 \int dx_1 \dots dx_A (1 + \sum_{i < j} h_{ij} + \sum_{i < j < k} h_{ij} h_{jk} + \dots) |\Phi(x_1, \dots, x_A)|^2},$$

dove $h_{ij} \equiv h(r_{ij})$.

Usando la definizione di sottodeterminante (12.40) il numeratore, \mathcal{N} , e il denominatore, \mathcal{D} , dell'equazione precedente possono essere espressi come somme di termini caratterizzati dal numero di funzioni h :

$$\mathcal{N} = \frac{A(A-1)}{\rho^2} f^2(r_{12}) \int dx_3 \dots dx_A \left(1 + \sum_{i < j} h_{ij} + \sum_{i < j < k} h_{ij} h_{jk} + \dots \right) \Delta_A, \quad (12.46)$$

$$\mathcal{D} = \int dx_1 \dots dx_A \left(1 + \sum_{i < j} h_{ij} + \sum_{i < j < k} h_{ij} h_{jk} + \dots \right) \Delta_A. \quad (12.47)$$

Riscrivo le espressioni di \mathcal{N} e \mathcal{D} raggruppando i termini con lo stesso numero di punti interni p , e li indico come $X^{(p)}(1, 2, 3, \dots, p)$. Ad esempio

$$X^{(3)}(1, 2; i) = h_{1i} + h_{2i} + h_{1i} h_{2i}.$$

L'espressione della TBDF può essere espressa come

$$g(x_1, x_2) = \frac{A(A-1)}{\rho^2} f^2(r_{12}) \int dx_3 \dots dx_A \Delta_A \left[1 + \sum_{p=3}^A \frac{(A-2)!}{(p-2)!(A-p)!} X^{(p)}(1, 2; \dots, p) \right] \left[\int dx_1 \dots dx_A \Delta_A \left(1 + \sum_{p=2}^A \frac{A!}{p!(A-p)!} X^{(p)}(1, \dots, p) \right) \right]^{-1}.$$

I termini fattoriali che moltiplicano le funzioni $X^{(p)}$ prendono in considerazione il fatto che le permutazioni dei punti interni p non modificano il valore del diagramma.

Usando la proprietà (12.42) dei sottodeterminanti possiamo integrare l'espressione precedente della TBDF su tutte le coordinate che non sono raggiunte dalle correlazioni, cioè non presenti nelle funzioni $X^{(p)}$. In questa maniera si ottengono le seguenti espressioni del numeratore e del denominatore TBDF

$$\mathcal{N} = A! \frac{f^2(r_{12})}{\rho^2} \sum_{p=2}^A \frac{1}{(p-2)!} \int dx_3 \dots dx_p X^{(p)}(1, 2; \dots, p) \Delta_p(1, \dots, p), \quad (12.48)$$

$$\mathcal{D} = A! \sum_{p=0}^A \frac{1}{p!} \int dx_1 \dots dx_p X^{(p)}(1, \dots, p) \Delta_p(1, \dots, p). \quad (12.49)$$

È possibile estendere all'infinito il limite superiore di tutte le somme delle precedenti espressioni usando la proprietà (12.43) dei sottodeterminanti. Ogni diagramma può essere separato in parti connesse e non connesse. Chiamo $\mathcal{L}_n(1, 2, i_3, \dots, i_n)$ la parte connessa dei vari termini del diagramma che contengono i punti esterni 1 e 2. In questi diagrammi i punti interni i_3, \dots, i_n sono collegati ai punti 1 and 2 almeno da una linea di correlazione statistica oppure dinamica. Chiamo $\mathcal{U}_{p-n}(i_{n+1}, \dots, i_p)$ la parte non connessa di un diagramma. Non ci sono connessioni, sia dinamiche che statistiche tra i punti di \mathcal{U} e quelli di \mathcal{L} . Il contributo di \mathcal{L}_n non viene modificato per una permutazione qualsiasi dei suoi punti interni. La stessa proprietà è valida anche per i punti interni dei termini \mathcal{U}_{p-n} . Per questo motivo ogni diagramma \mathcal{N}

separato in \mathcal{L}_n e \mathcal{U}_{p-n} genera $(p-2)!/(n-2)!(p-n)!$ volte lo stesso contributo. È possibile esprimere il numeratore come

$$\mathcal{N} = A! \frac{f^2(r_{12})}{\rho^2} \sum_{n=2}^{\infty} \frac{1}{(n-2)!} \int dx_3 \dots dx_n \mathcal{L}_n(1, 2; \dots, n) \left[\sum_{q=0}^{\infty} \frac{1}{q!} \int dx_1 \dots dx_q \mathcal{U}_q(1, \dots, q) \right], \quad (12.50)$$

dove abbiamo definito $q = p - n$. Le stesse considerazioni possono essere estese al denominatore (12.49). Poiché in questo caso non ci sono punti esterni, quei diagrammi classificati come connessi, non sono presenti. Solo i diagrammi \mathcal{U}_n contribuiscono al denominatore.

$$\mathcal{D} = A! f^2(r_{12}) \left[\sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \int dx_1 \dots dx_n \mathcal{U}_n(1, \dots, n) \right]. \quad (12.51)$$

Questa espressione è identica a quella del contributo dei termini non connessi del numeratore. Nel calcolo della TBDF, il denominatore semplifica il contributo di tutti i termini non connessi del numeratore. La TBDF può essere espressa come

$$g(x_1, x_2) = g(r_{12}) = \frac{f^2(r_{12})}{\rho^2} \left[\Delta_2(1, 2) + \sum_{p=3}^{\infty} \frac{1}{(p-2)!} \int dx_3 \dots dx_p \mathcal{L}_p(1, 2; \dots, p) \right]. \quad (12.52)$$

Il risultato precedente mostra che la TBDF può essere calcolata considerando solo termini connessi.

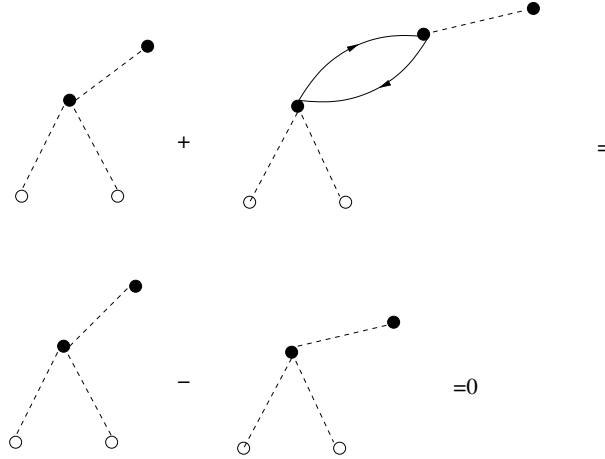


Figura 12.7: Esempio di cancellazione tra due diagrammi FHNC riducibili. L'anello statistico nella parte alta introduce un segno meno, e, quindi, il contributo totale dei due diagrammi è nullo.

In analogia con il caso bosonico, definiamo i diagrammi riducibili come quei diagrammi connessi che contengono un punto, il punto di articolazione, che permette di esprimere il contributo totale del diagramma come prodotto di due termini. Un esempio di diagrammi riducibili è dato nella figura 12.7. Come nel caso bosonico, la fattorizzazione dei diagrammi riducibili in due, o più, sottodiagrammi è legata all'invariata traslazionale del sistema. Anche nel caso fermionico è possibile mostrare che i diagrammi riducibili non contribuiscono al calcolo della TBDF. Tuttavia, nel caso fermionico, il meccanismo che permette l'eliminazione del contributo dei diagrammi riducibili è differente da quello presentato nel caso bosonico. In aggiunta, la cancellazione di diagrammi riducibili è esatta, non limitata a termini $1/A$.

L'idea di base del meccanismo di riduzione è la seguente. Consideriamo, per esempio, il caso dei diagrammi mostrato nella parte alta della figura 12.7. I due diagrammi differiscono per la presenza di un

anello statistico aggiuntivo che contribuisce per un fattore $-\ell(k_F r_{ij})/\nu$. Per invarianza traslazionale del sistema, è possibile calcolare il valore del secondo diagramma fattorizzando il contributo dell'anello da quello del resto del diagramma senza anello. Poiché la funzione di Slater (12.45) è normalizzata all'unità, il contributo dell'anello di scambio si riduce ad un fattore -1. Quindi il contributo del diagramma con un anello aggiuntivo è identico a quello dell'altro diagramma, ma con un segno meno. Come indicato nella parte bassa della figura, il contributo totale è nullo.

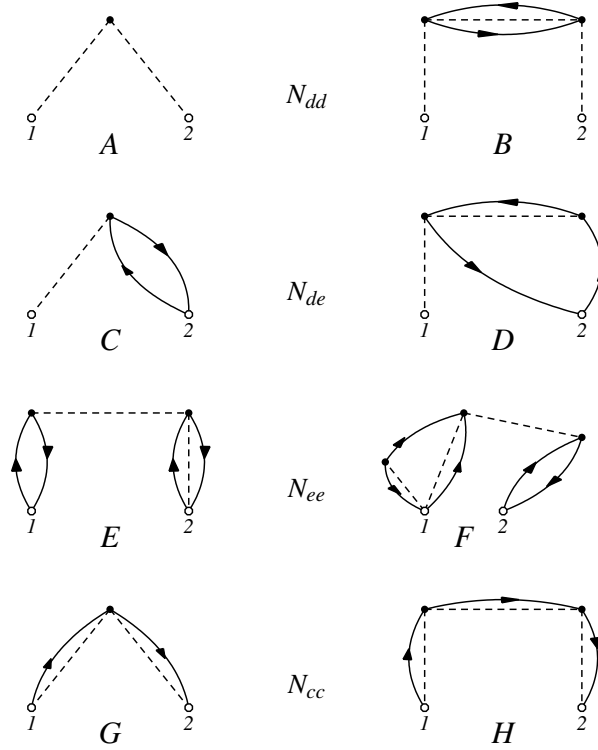


Figura 12.8: I vari tipi di diagrammi nodali richiesti dalla equazioni FHNC. I pedici classificano i diagrammi rispetto al tipo di correlazione che raggiunge i punti esterni 1 e 2.

La TBDF fermionica (12.52) può essere calcolata considerando solo il contributo dei diagrammi irriducibili, in analogia a quanto fatto per i bosoni con l'equazione (12.22). In stretta analogia, si vedano le equazioni (12.22 - 12.24), è possibile mostrare che il contributo di tutti i diagrammi composti può essere ottenuto considerando solo diagrammi semplici, classificati in nodali ed elementari. I diagrammi nodali ed elementari nel caso fermionico sono definiti in analogia al caso bosonico, ma vengono considerate sia le correlazioni dinamiche che statistiche. La presenza di correlazioni statistiche non permette di formulare una sola equazione integrale che permette di calcolare in forma chiusa il contributo di tutti i diagrammi nodali, come viene fatto dall'equazione (12.28). In ogni caso è possibile formulare un sistema di equazioni integrali che descrivono i contributi dei diagrammi nodali caratterizzati dal tipo di correlazione che raggiunge i punti esterni 1 e 2.

Gli esempi grafici del tipo di diagrammi richiesti per ottenere le diverse equazioni integrali sono presentati nella figura 12.8. Nei diagrammi A e B i punti esterni sono raggiunti solo da equazioni dinamiche. Per questo motivo sono identificati con i pedici *dd* (dynamical-dynamical) (N_{dd}). I diagrammi C e D hanno correlazioni dinamiche che raggiungono il punto 1 e due correlazioni statistiche che raggiungono il punto 2. In questo caso, i pedici che identificano i diagrammi sono *de* (dynamical-exchange). I dia-

grammi E e F sono indicati come *ee* (exchange-exchange) poiché entrambi sono raggiunti da due linee statistiche. È anche utile definire diagrammi che sono raggiunti da una correlazione statistica che parte da 1 e arriva in 2 e forma un anello aperto. Questi diagrammi sono identificati come *cc* (cyclic-cyclic) e non contribuiscono direttamente al calcolo della TBDF.

Come discusso nel caso bosonico per l'equazione (12.28), anche in questo caso, il contributo totale dei diagrammi nodali può essere ottenuto effettuando il prodotto di convoluzione dei vari termini dei diagrammi nel punto nodale. Nel sistema fermionico, il principio di esclusione di Pauli proibisce la convoluzione tra lo stesso tipo di diagrammi. Ho già menzionato che una conseguenza del principio di esclusione è che i punti interni di un diagramma possono essere raggiunti solo da due linee statistiche, o da nessuna. Questo implica, ad esempio, che la convoluzione di un diagramma *cc* con un diagramma di diverso tipo non è permessa. Un altro esempio è che un diagramma di tipo *e* nel punto nodale può essere integrato con convoluzione solo da un diagramma di tipo *d* in quel punto.

Come fatto nel caso bosonico, chiamo *N* la somma di tutti i diagrammi nodali e *X* quella dei diagrammi irriducibili non-nodali. Naturalmente, adesso *N* e *X* sono identificati dai pedici *dd*, *de*, *ee* e *cc*. Per i diagrammi nodali si ha il seguente sistema di equazioni

$$\begin{aligned}
N_{dd}(r_{12}) &= \left(X_{dd}(r_{13}) + X_{de}(r_{13})|\rho(\mathbf{r}_3)[N_{dd}(r_{32}) + X_{dd}(r_{32})] \right) \\
&\quad + \left(X_{dd}(r_{13})|\rho(\mathbf{r}_3)[N_{ed}(r_{32}) + X_{ed}(r_{32})] \right), \\
N_{de}(r_{12}) &= \left(X_{dd}(r_{13}) + X_{de}(r_{13})|\rho(\mathbf{r}_3)[N_{de}(r_{32}) + X_{de}(r_{32})] \right) \\
&\quad + \left(X_{dd}(r_{13})|\rho(\mathbf{r}_3)[N_{ee}(r_{32}) + X_{ee}(r_{32})] \right), \\
N_{ee}(r_{12}) &= \left(X_{ed}(r_{13}) + X_{ee}(r_{13})|\rho(\mathbf{r}_3)[N_{de}(r_{32}) + X_{de}(r_{32})] \right) \\
&\quad + \left(X_{ed}(r_{13})|\rho(\mathbf{r}_3)[N_{ee}(r_{32}) + X_{ee}(r_{32})] \right), \\
N_{cc}(r_{12}) &= \left(X_{cc}(r_{13})|\rho(\mathbf{r}_3)[N_{cc}(r_{32}) + X_{cc}(r_{32}) - \ell(k_F r_{32})/\nu] \right). \tag{12.53}
\end{aligned}$$

Le equazioni per i diagrammi non-nodali sono:

$$\begin{aligned}
X_{dd}(r_{12}) &= g_{dd}(r_{12}) - N_{dd}(r_{12}) - 1, \\
X_{de}(r_{12}) &= g_{dd}(r_{12})[N_{de}(r_{12}) + E_{de}(r_{12})] - N_{de}(r_{12}), \\
X_{ee}(r_{12}) &= g_{dd}(r_{12})\{N_{ee}(r_{12}) + E_{ee}(r_{12}) + [N_{de}(r_{12}) + E_{de}(r_{12})]^2 \\
&\quad - \nu[N_{cc}(r_{12}) + E_{cc}(r_{12}) - \frac{1}{\nu}\ell(k_F r_{12})]^2\} - N_{ee}(r_{12}), \\
X_{cc}(r_{12}) &= g_{dd}(r_{12})[N_{cc}(r_{12}) + E_{cc}(r_{12}) - \frac{1}{\nu}\ell(k_F r_{12})] \\
&\quad - N_{cc}(r_{12}) + \frac{1}{\nu}\ell(k_F r_{12}). \tag{12.54}
\end{aligned}$$

Le definizioni parziali delle TBDF sono:

$$\begin{aligned}
g_{dd}(r_{12}) &= f^2(r_{12})e^{N_{dd}(r_{12})+E_{dd}(r_{12})}, \\
g_{de}(r_{12}) &= N_{de}(r_{12}) + X_{de}(r_{12}), \\
g_{ed}(r_{12}) &= g_{de}(r_{12}), \\
g_{ee}(r_{12}) &= N_{ee}(r_{12}) + X_{ee}(r_{12}), \\
g_{cc}(r_{12}) &= N_{cc}(r_{12}) + X_{cc}(r_{12}) - \frac{1}{\nu}\ell(k_F r_{12}). \tag{12.55}
\end{aligned}$$

La TBDF totale si ottiene sommando i termini parziali:

$$g(r_{12}) = g_{dd}(r_{12}) + g_{ed}(r_{12}) + g_{de}(r_{12}) + g_{ee}(r_{12}) \quad (12.56)$$

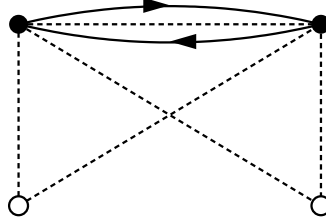


Figura 12.9: Diagramma elementare a 4 punti.

Il sistema di equazioni (12.53), (12.54), (12.55) e (12.56) formano le equazioni Fermi HyperNetted Chain (FHNC). Come già menzionato nel caso bosonico delle equazioni HNC, anche le equazioni FHNC permettono di calcolare in forma chiusa tutti i diagrammi composti e non-nodali. Anche in questo caso rimangono esclusi i contributi di tutti i diagrammi elementari, come quello della figura 12.9, devono essere inclusi individualmente. Anche in questo caso, in analogia al caso HNC, si usa la nomenclatura FHNC/0, FHNC/4 ecc., per indicare i diagrammi elementari inseriti nel calcolo.

La teoria FHNC è stata applicata allo studio dell'elio liquido fermionico. Si tratta del caso in cui i nuclei degli atomi di elio sono ^3He e non ^4He . Le proprietà dell'elio liquido fermionico sono piuttosto differenti da quelle del caso bosonico, proprio perché i due liquidi sono soggetti a due tipi differenti di statistiche quantistiche. Nel caso dell'elio liquido fermionico l'hamiltoniana ha potenziali puramente scalari prodotti dall'interazione coulombiana, come discusso nel paragrafo 3.4.

Dato che l'hamiltoniana nucleare è molto più complessa, come discusso nella Sezione 3.3, l'approccio FHNC così presentato non è adeguato a coglierne tutte le sfaccettature. Per questo motivo nelle applicazioni a sistemi nucleari l'ipotesi di Jastrow (12.8) viene modificata aggiungendo termini di correlazione che dipendono dagli operatori utilizzati per descrivere l'hamiltoniana nucleare (3.2)

$$\mathcal{F}(1, \dots, A) = \mathcal{S} \left(\prod_{j>i=1}^A F_{ij} \right) = \mathcal{S} \left(\prod_{j>i=1}^A \sum_{p=1}^6 f_p(r_{ij}) O_{ij}^p \right). \quad (12.57)$$

con gli operatori definiti come

$$O_{ij}^{p=1,6} = 1, \boldsymbol{\tau}_i \cdot \boldsymbol{\tau}_j, \boldsymbol{\sigma}_i \cdot \boldsymbol{\sigma}_j, (\boldsymbol{\sigma}_i \cdot \boldsymbol{\sigma}_j)(\boldsymbol{\tau}_i \cdot \boldsymbol{\tau}_j), S_{ij}, S_{ij}(\boldsymbol{\tau}_i \cdot \boldsymbol{\tau}_j). \quad (12.58)$$

Questa correlazione più complessa è più adeguata per trattare il caso nucleare. Lo svantaggio consiste nel fatto che mentre per la funzione di correlazione scalare non ci sono problemi di commutazione con i termini dell'hamiltoniana, e quindi il passaggio (12.15) che definisce la funzione h ha valore universale, in questo caso è necessario considerare che i vari termini della correlazione non necessariamente commutano

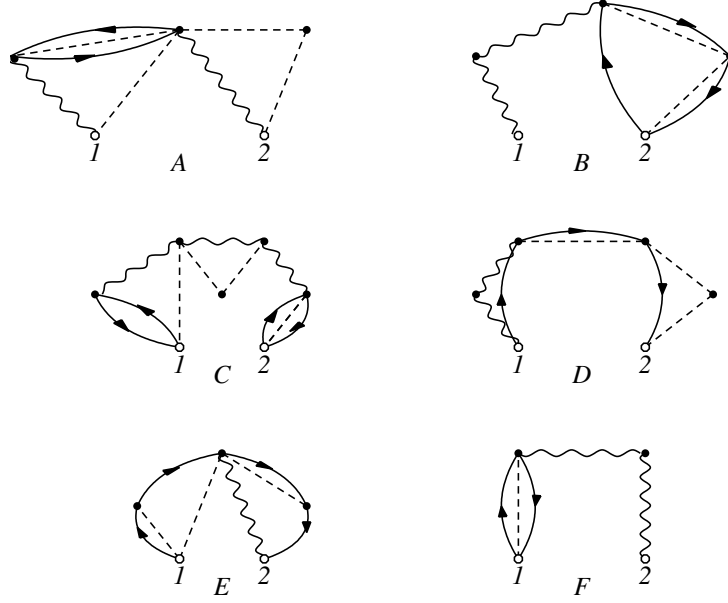


Figura 12.10: Esempi di diagrammi della teoria FHNC/SOC. Le linee ondulate rappresentano correlazioni operatoriali.

con i termini dell'hamiltoniana nucleare e tra di loro. Questo fatto non permette di ottenere equazioni in forma chiusa senza ricorrere ad un'altra approssimazione.

È possibile sommare in forma chiusa catene di correlazioni dinamiche operatoriali che presentano una sola correlazione tra due punti, come, ad esempio, succede nei diagrammi presentati nella figura 12.10. La teoria FHNC/SOC con l'eventuale inclusione del diagramma elementare della figura 12.9 è la teoria più sofisticata di tipo CBF utilizzata nell'ambito della fisica nucleare. Questo apparato teorico considera hamiltoniana che usano solo interazioni a due corpi. L'inserimento di termini di interazione a tre corpi non è incluso nello schema di calcolo diagrammatico della FHNC, ma, in analogia ai diagrammi elementari, viene inserito considerando i singoli diagrammi.

12.3.1 Materia nucleare infinita

Come esempio di applicazione della teoria della teoria CBF mostro i risultati ottenuti per materia nucleare. Il sistema che studiamo ha invarianza traslazionale e densità costante di nucleoni definita dalla somma $\rho = \rho_p + \rho_n$ delle densità, costanti di protoni ρ_p e neutroni ρ_n . L'energia per nucleone $e = E/A$ è tradizionalmente scritta come somma di potenze pari del parametro di asimmetria $\delta = (\rho_n - \rho_p)/\rho$, cioè

$$e(\rho, \delta) = e(\rho, 0) + e_{\text{sym}}(\rho) \delta^2 + \mathcal{O}(\delta^4). \quad (12.59)$$

Attorno al punto di minimo della materia nucleare simmetrica, alla densità ρ_0 , i due coefficienti di questa equazione sono sviluppati in potenze del parametro $\epsilon = (\rho - \rho_0)/(3\rho_0)$.

Per la materia simmetrica ottengo

$$e(\rho, 0) = a_V + \frac{1}{2} K_V \epsilon^2 + \dots, \quad (12.60)$$

	exp	AFDMC	CBF	D1M	SLy5	DDME2
ρ_0	0.16 ± 0.01	0.16	0.16	0.16	0.16	0.15
$e(\rho_0, 0)$	-16.0 ± 0.1	-16.00	-16.00	-16.01	-15.98	-16.13
B	220 ± 30	276	269	217	228	278
$e_{\text{sym}}(\rho_0)$	30-35	31.3	33.94	29.45	32.66	33.20
\mathcal{L}	88 ± 25	60.10	58.08	25.41	48.38	54.74

Tabella 12.1: Proprietà della materia nucleare infinita ottenute con vari calcoli. La densità di saturazione ρ_0 è espressa in fm^{-3} . Tutte le altre quantità in MeV. I risultati Monte Carlo (AFDMC) sono dalla referenza [Gan10], quelli della teoria CBF dalla referenza [Akm98]. Gli altri risultati da [Co12].

dove il termine del primo ordine in ϵ , legato alla derivata prima è zero perché $e(\rho, 0)$ ha un minimo per $\rho = \rho_0$. Nel termine quadratico, legato alla derivata seconda, il coefficiente, definito come

$$B = 9\rho_0^2 \left. \frac{\partial^2 e(\rho, 0)}{\partial \rho^2} \right|_{\rho=\rho_0} \quad (12.61)$$

è chiamato modulo di compressione di volume, vedi Eq. (2.60).

Il secondo coefficiente dell'equazione Eq. (12.59), cioè l'energia di simmetria, è sviluppato come

$$e_{\text{sym}}(\rho) = a_{\text{sym}} + \mathcal{L} \epsilon + \dots \quad (12.62)$$

con il coefficiente

$$\mathcal{L} = 3\rho_0 \left. \frac{\partial e_{\text{sym}}(\rho)}{\partial \rho} \right|_{\rho=\rho_0} \quad (12.63)$$

Nella tabella 12.1 mostro i valori di queste quantità calcolate con diverse teorie al valore della densità di saturazione ρ_0 . Il confronto viene fatto con i valori empirici (exp). I valori ottenuti con la teoria (CBF) [Akm98] sono confrontati con quelli ottenuti da un calcolo di Auxiliary Field Diffusion (AFDMC) [Gan10] entrambi usano la stessa interazione microscopica di tipo fenomenologico. Gli altri risultati sono ottenuti da vari calcoli Hartree-Fock, con varie interazioni.

Tutti i valori delle densità di saturazione e del minimo di energia sono in accordo con piccole variazioni, dal 2% al 0.4%, rispettivamente. Anche le altre variabili hanno valori molto simili nei vari calcoli. Le differenze emergono nei valori di \mathcal{L} .

Le equazioni di stato per pura materia neutronica (a), materia nucleare simmetrica (b) ed energia di simmetria (c) sono mostrare nella figura 12.11. Se tutti i calcoli mostrano un buon accordo nel punto di saturazione di materia nucleare simmetrica, si vedono notevoli differenze quando ci si allontana da questo punto.

Quello che interessa in questo contesto è l'accordo dei risultati ottenuti con i due calcoli microscopici CBF e AFDMC.

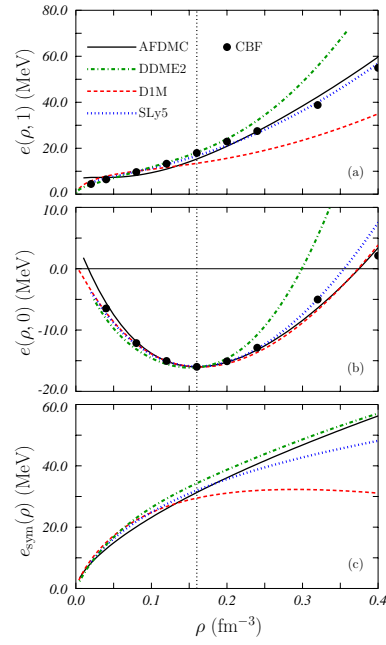


Figura 12.11: Equazioni di stato per pura materia neutronica (a), materia nucleare simmetrica ed energia di simmetria(c) ottenute con diverse teorie. I cerchi neri rappresentano i risultati della teoria CBF [Akm98], le linee nere quelli di calcoli Montecarlo [Gan10] e le altre linee diversi risultati di calcoli di campo medio [Co12].

Parte V

Teorie fenomenologiche

Capitolo 13

Teorie effettive

Le teorie considerate fino a questo momento si basano su hamiltoniane microscopiche, quelle presentate nel Cap. 3, che contengono interazioni costruite per riprodurre le proprietà dei sistemi a due corpi. A piccole distanze tra le particelle, queste interazioni sono fortemente repulsive. Lo scopo delle teorie microscopiche è quello di sviluppare tecniche non perturbative per poter gestire questa caratteristica dell'interazione. Nelle teorie ispirate alla teoria dei campi l'idea è quella di trasformare l'interazione microscopica in modo che non ci sia più il nocciolo repulsivo. Ad esempio, nel caso della teoria di Brueckner, Cap. 8, questo scopo è raggiunto sommando tutti i diagrammi tipo *ladder*. Nel caso delle teorie ispirate alla Meccanica Statistica, come la teoria CBF, il problema del nocciolo repulsivo viene risolto inserendo una funzione di correlazione che impedisce a due particelle di avvicinarsi fino a raggiungere quelle distanze in cui la parte fortemente repulsiva dell'interazione comincia ad essere importante. In entrambi gli approcci l'interazione tra le particelle è una quantità esterna alla teoria utilizzata, e, conseguentemente, indipendente da essa.

Le teorie effettive affrontano il problema a multicorpi in maniera molto differente. L'idea è quella di trovare un'hamiltoniana, effettiva, che riproduca gli stessi autovalori di quella vera, quindi l'equazione

$$H|\Psi_n\rangle = E_n|\Psi_n\rangle , \quad (13.1)$$

è sostituita dall'equazione

$$H^{\text{eff}}|\Psi_n^{\text{eff}}\rangle = E_n|\Psi_n^{\text{eff}}\rangle . \quad (13.2)$$

Formalmente possiamo identificare la relazione tra H e H^{eff} utilizzando la solita separazione dell'hamiltoniana in due parti $H = H_0 + H_1$, e considerando l'operatore di proiezione P sugli autostati di H_0 , e l'operatore Q che è il suo complemento

$$P^2 = P ; \quad Q^2 = Q ; \quad Q = 1 - P ; \quad PQ = 0 , \quad (13.3)$$

dove

$$H_0P|\Psi_n\rangle = E_n^0P|\Psi_n\rangle \Rightarrow PH_0|\Psi_n\rangle = E_n^0P|\Psi_n\rangle , \quad (13.4)$$

poiché P e H_0 commutano. L'equazione (13.1) può essere riscritta come

$$H_1|\Psi_n\rangle = (E_n - H_0)|\Psi_n\rangle , \quad (13.5)$$

e moltiplicando a sinistra per P ottengo

$$\begin{aligned} PH_1|\Psi_n\rangle &= P(E_n - H_0)|\Psi_n\rangle = (E_n - H_0)P|\Psi_n\rangle \\ PH_1(P + Q)|\Psi_n\rangle &= (E_n - H_0)P|\Psi_n\rangle \\ PH_1Q|\Psi_n\rangle &= (E_n - H_0 - PH_1)P|\Psi_n\rangle . \end{aligned} \quad (13.6)$$

Procedendo in maniera analoga e moltiplicando a sinistra per Q , ottengo

$$QH_1P|\Psi_n\rangle = (E_n - H_0 - QH_1)Q|\Psi_n\rangle . \quad (13.7)$$

Date le proprietà di questi due operatori, posso riscrivere le due equazioni come

$$(PH_1Q)Q|\Psi_n\rangle = (E_n - H_0 - PH_1P)P|\Psi_n\rangle \quad (13.8)$$

$$(QH_1P)P|\Psi_n\rangle = (E_n - H_0 - QH_1Q)Q|\Psi_n\rangle . \quad (13.9)$$

Risolvero formalmente l'equazione (13.9) per $Q|\Psi_n\rangle$ sostituisco il risultato nell'equazione (13.8), e ottengo

$$\begin{aligned} (PH_1Q) \frac{1}{E_n - H_0 - QH_1Q} (QH_1P)P|\Psi_n\rangle &= (E_n - H_0 - PH_1P)P|\Psi_n\rangle \\ \left[H_0 + P \left(H_1 + H_1Q \frac{1}{E_n - H_0 - QH_1Q} QH_1 \right) P \right] P|\Psi_n\rangle &= E_n P|\Psi_n\rangle . \end{aligned} \quad (13.10)$$

Questa equazione ha la struttura dell'equazione (13.2) in cui si può identificare l'interazione effettiva con il termine

$$V^{\text{eff}} = P \left(H_1 + H_1Q \frac{1}{E_n - H_0 - QH_1Q} QH_1 \right) P . \quad (13.11)$$

Una prima considerazione è che l'interazione effettiva dipende dall'energia E_n . La seconda considerazione, più rilevante in questo contesto, è che l'interazione effettiva dipende da P , ovvero da come si separa l'hamiltoniana. L'interazione effettiva è quindi legata alla teoria nella quale viene utilizzata. Ogni teoria ha la propria interazione effettiva.

La derivazione che ho presentato ha un valore puramente formale per mostrare come, in linea di principio, sia possibile definire rigorosamente le teorie effettive e legarle alle teorie microscopiche. Dal punto di vista pragmatico, risolvere le equazioni che ho mostrato è altrettanto complicato che risolvere l'equazione di Schrödinger originale.

Il problema viene superato in maniera fenomenologica utilizzando interazioni che contengono dei parametri liberi i cui valori sono fissati in modo tale che la teoria possa riprodurre selezionati dati empirici del sistema a molti corpi che si vuole studiare. Scopo della teoria è quello di descrivere proprietà del sistema non utilizzate nel processo di definizione della interazione. Ovviamente queste interazioni hanno caratteristiche differenti rispetto a quelle microscopiche, soprattutto non hanno nocciolo repulsivo a piccole distanze. In generale, le teorie effettive affrontano, e risolvono, il problema a molti corpi in modo molto più semplice rispetto alle teorie microscopiche. Per questo motivo sono ampiamente utilizzate nel confronto con i dati empirici, soprattutto se i sistemi da descrivere sono molto complessi, cioè privi di simmetrie evidenti. Il collegamento tra teorie effettive e microscopiche e, quindi, tra interazioni effettive e microscopiche è un tema di ricerca molto attuale.

Capitolo 14

Teoria dei liquidi di Fermi

14.1 Introduzione

Una delle teorie effettive di maggior successo è quella dei liquidi di Fermi formulata da L. V. Landau verso la fine degli anni '50 del secolo scorso, e poi raffinata da altri autori, soprattutto della scuola russa. L'idea di base è quella che lo spettro di eccitazione di un sistema di particelle interagenti possa essere ben descritto da un sistema di quasi-particelle non interagenti.

Questa teoria fu originariamente formulata da Landau per descrivere sistemi fermionici infiniti, soprattutto elio liquido fermionico. Si tratta di un sistema di atomi di elio i cui i nuclei sono composti dall'isotopo ^3He , quindi ogni atomo è un fermione. La teoria di Landau è un ottimo esempio di teoria effettiva ed ha avuto molto successo, al punto da essere ampliata per trattare sistemi finiti ed applicata allo studio della struttura dei nuclei atomici. È possibile collegare i parametri fondamentali della teoria ad una formulazione microscopica, si vedano ad esempio [Abr75, Bru04, Gro91].

14.2 Continuità adiabatica

L'idea di base della teoria di Landau è che si possa passare dalla descrizione di un sistema a multicorpi non interagente ad uno di particelle interagenti accendendo adiabaticamente l'interazione. Abbiamo utilizzato questo stratagemma nel paragrafo 6.4, ma in quel caso si trattava di un espediente teorico-matematico per legare i due sistemi. Nel caso della teoria di Landau l'idea è molto più fenomenologica, e quindi merita una discussione più approfondita per definirne i limiti di validità.

Per chiarire meglio la situazione, considero un sistema modello ad una dimensione, nel quale le particelle interagiscono con un potenziale del tipo

$$V(x, t) = -V_0(t)e^{-ax^2} , \quad (14.1)$$

dove a , delle dimensioni di una lunghezza⁻², è una costante positiva. La profondità del potenziale cambia con il tempo, e supponiamo di essere interessati al cambiamento da un valore iniziale V_{01} ad uno finale V_{02} .

L'equazione di Schrödinger di singola particella è

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(x, t) = H(t) \psi(x, t) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x, t) \right) \psi(x, t) . \quad (14.2)$$

Se i tempi in cui $V_0(t)$ cambia in maniera sensibile rispetto al valore iniziale, e all'energia cinetica, sono molto più grandi dei tempi considerati per analizzare lo stato di moto della particella, possiamo cercare

una soluzione adiabatica in cui considerare $V_0(t)$ una costante

$$\psi_{\text{adia}}(x, t) \simeq \psi_{V_0(t)}(x) e^{-\frac{i}{\hbar} E_{V_0(t)} t} , \quad (14.3)$$

dove $E_{V_0(t)}$ è l'autovalore dell'energia dell'equazione di Schrödinger indipendente dal tempo di cui $\psi_{V_0(t)}(x)$ è autostato di

$$H(t) \psi_{V_0(t)}(x) = E_{V_0(t)} \psi_{V_0(t)}(x) . \quad (14.4)$$

Controllo la validità dell'ipotesi (14.3) sostituendo nell'equazione (14.2) questa espressione

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi_{\text{adia}}(x, t) = H(t) \psi_{\text{adia}}(x, t) = E_{V_0(t)} \psi_{\text{adia}}(x, t) + i\hbar \left(\frac{\partial \psi_{\text{adia}}(x, t)}{\partial V_0(t)} \right) \left(\frac{\partial V_0(t)}{\partial t} \right) , \quad (14.5)$$

quindi l'approssimazione è tanto più valida quanto più il secondo termine dell'equazione è piccolo, ovvero la derivata di $V_0(t)$ rispetto al tempo è piccola.

Se il tasso di cambiamento di $V(t)$ è abbastanza piccolo, si può raggiungere V_{02} cambiando poco a poco la soluzione da $V_0(t = t_1) = V_{01}$ fino a raggiungere il nuovo valore. Il punto essenziale è che non ci devono essere discontinuità. Ad esempio, se lo stato iniziale è uno stato legato del sistema, anche lo stato finale lo deve essere. Se invece lo stato finale, quando $V_0(t = t_2) = V_{02}$ è uno stato nel continuo, non c'è modo che con questa procedura si possa ottenere questo nuovo stato, indipendentemente da quanto lentamente si faccia attuare il cambiamento della profondità del potenziale. Lo stesso ragionamento può essere esteso al caso delle transizioni di fase, che non possono essere descritte da questa teoria.

14.3 Il concetto di quasi-particella

Le proprietà di un sistema di fermioni non interagenti a invarianza traslazionale, detto gas di Fermi, sono state presentate nel Paragrafo 2.3. Le funzioni d'onda di singola particella sono onde piane caratterizzate dal numero d'onda \mathbf{k} legato all'impulso dalla relazione $\mathbf{p} = \hbar \mathbf{k}$, Eq. (2.40). Gli autostati di questo sistema sono determinanti di Slater delle onde piane. Per definire l'autostato del sistema è sufficiente indicare quali autostati di \mathbf{k} sono occupati. Per questo motivo si utilizza la funzione di distribuzione $n(k)$, dove ho indicato con k il modulo di \mathbf{k} . La funzione di distribuzione dipende solo dal modulo di \mathbf{k} perché considero che il mezzo sia isotropo. Nello stato fondamentale la funzione di distribuzione è $n(k) = \Theta(k_F - k)$ dove k_F è l'impulso di Fermi, e Θ la funzione gradino. La distribuzione $n(k)$ per lo stato fondamentale è disegnata nella figura 14.1.

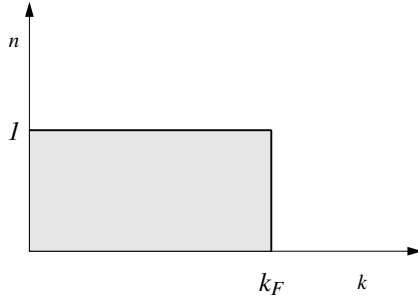


Figura 14.1: Funzione di distribuzione $n(k)$ per lo stato fondamentale del sistema di fermioni.

Utilizzando il linguaggio introdotto nel Cap. 5, stati eccitati di questo sistema sono generati dalla creazione di stati particella e buca. La descrizione di stati eccitati le cui energie sono piccole rispetto all'energia totale del sistema avviene considerando piccole fluttuazioni $\delta n(k)$ della distribuzione $n(k)$ dello stato fondamentale. L'energia dello stato fondamentale viene modificata da queste fluttuazioni per un valore di

$$\delta E = \sum_k \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \delta n(k) . \quad (14.6)$$

L'energia di singola particella è ottenibile come derivata funzionale dell'energia $\delta E / \delta n(k) = \hbar^2 k^2 / 2m$. Dato che togliere una particella, cioè creare uno stato buca, fa diminuire l'energia, $\delta n(k)$ deve essere necessariamente negativo. Ovviamente, avviene il contrario per la creazione di una particella.

Queste considerazioni riguardano un gas di fermioni non-interagenti. La situazione è più complessa quando si inserisce l'interazione tra i fermioni nella descrizione del sistema. L'idea della teoria di Landau, è quella di passare dal sistema di fermioni non-interagenti, che d'ora in poi chiamerò gas di Fermi, a quello di un sistema di fermioni interagenti, che chiamerò sistema reale, accendendo poco a poco, in maniera adiabatica, l'interazione. Per fare questo è necessario fare l'ipotesi che gli stati del gas di Fermi si trasformino in stati del sistema reale man mano che l'interazione aumenta. In particolare, supponiamo che l'evoluzione dello stato fondamentale del gas di Fermi conduca allo stato fondamentale del sistema reale. È da notare che l'ipotesi di lavoro che stiamo facendo non esclude che, nel sistema reale, si formino degli stati che scompaiono nel gas di Fermi, quando l'interazione è spenta.

Aggiungiamo al gas di Fermi una particella con $k > k_F$, e poi attiviamo l'interazione. In questo modo otteniamo uno stato del sistema reale. Possiamo affermare in questo modo di aver aggiunto una *quasi-particella* con vettore d'onda k allo stato fondamentale del sistema reale. In maniera analoga, definiamo *quasi-buco* di vettore d'onda $k < k_F$ la situazione nella quale togliamo una particella con questo k dal gas di Fermi e poi attiviamo l'interazione.

Ci sono proprietà del sistema caratterizzate da operatori che commutano con l'hamiltoniana che sono conservate sia nel gas di Fermi che nel sistema reale; ad esempio, il numero di particelle, la carica totale, la corrente, lo spin. Per questo motivo, le quasi-particelle possono essere caratterizzate dai numeri quantici che individuano le particelle, spin, impulso \mathbf{p} , carica elettrica ecc. .

La descrizione di eccitazioni di un sistema reale in termini di creazione e distruzione di quasi-particella è limitata ad una piccola finestra temporale. I tempi devono essere più brevi del tempo richiesto dall'eccitazione per spegnersi come conseguenza delle collisioni elastiche tra le particelle. D'altra parte devono essere sufficientemente lunghi da assicurare all'eccitazione di quasi-particella una precisa energia, secondo il principio di indeterminazione energia impulso.

Per quanto discusso sopra, le quasi-particelle conservano tutti i numeri quantici che caratterizzano le particelle, quindi anche le caratteristiche di fermioni, quindi la distribuzione delle quasi-particelle nello stato fondamentale del sistema reale è rappresentata dalla fig. 14.1, e la nozione di superficie di Fermi rimane valida anche per le quasi-particelle. L'eccitazione del sistema è misurata dalla deviazione

$$\delta n(k) = n(k) - n^0(k) \quad (14.7)$$

dove $n^0(k)$ è la distribuzione di quasi-particelle dello stato fondamentale rappresentata in fig. 14.1.

Perché la nozione di quasi-particella abbia significato i valori di $\delta n(k)$ devono essere apprezzabili solo per $k \simeq k_F$. L'affermazione che il sistema reale sia costituito da quasi-particelle che riempiono tutti gli stati fino alla superficie di Fermi, è erronea. Il concetto di quasi-particella è strettamente limitato a quegli stati attorno alla superficie di Fermi. La quasi-particella è un'eccitazione elementare del sistema reale per stati che si discostano poco dallo stato fondamentale. La teoria di Landau tratta di stati eccitati le cui differenze di energia rispetto allo stato fondamentale, cioè le energie di eccitazione, sono piccole rispetto al valore globale dell'energia dello stato fondamentale. La teoria di Landau non offre informazioni sullo stato fondamentale, che considera noto, ma si occupa di piccole fluttuazioni attorno ad esso.

Possiamo considerare l'energia E del sistema come un funzionale della funzione di distribuzione dei momenti $n(k)$. Per il gas di Fermi l'energia si trasforma nella somma delle energie cinetiche delle particelle, come descritto dall'equazione (14.6). Per un sistema reale la situazione è più complessa. Se si modifica $n^0(k)$ per una quantità $\delta n(k)$, la variazione dell'energia, al primo ordine, è data da

$$\delta E = \sum_k \epsilon_k \delta n(k) , \quad (14.8)$$

espressione che definisce

$$\epsilon_k = \delta E / \delta n(k) . \quad (14.9)$$

Per $k > k_F$, ϵ_k è la variazione dell'energia del sistema quando si aggiunge una quasi-particella, quindi è l'energia di quasi-particella. La definizione data per ϵ_k è legata alla fluttuazione dell'energia totale

del sistema. In questa teoria non c'è alcuna possibilità di ottenere informazioni sull'energia totale del sistema. In particolare, l'energia del sistema non è uguale alla somma delle energie di quasi-particella. Questo perché una volta aggiunta una particella in k , lo stato del sistema cambia, e l'energia della nuova particella $\epsilon_{k'}$ non è più quella ottenibile usando la (14.9) la cui variazione è fatta rispetto al vecchio stato, quello che non conteneva la particella k .

Per $k = k_F$, ϵ_k è l'energia acquisita aggiungendo una particella sulla superficie di Fermi. Il nuovo stato è lo stato fondamentale del sistema con $A + 1$ particelle. Si può scrivere

$$\epsilon_{k_F} = E_0(A + 1) - E_0(A) \equiv \mu , \quad (14.10)$$

dove $\mu = \partial E_0 / \partial A$ è la definizione di potenziale chimico.

L'espressione della variazione dell'energia (14.8) è valida al primo ordine. Questo permette di descrivere situazioni dominate da eccitazioni di singola quasi-particella. In generale, questo non è sufficiente, perché la densità di quasi-particelle è tale che non si può trascurare la loro interazione. Questo implica la necessità di andare oltre il primo ordine e considerare anche il secondo

$$\delta E = \sum_k \epsilon_k^0 \delta n(k) + \frac{1}{2} \sum_k \sum_{k'} f(k, k') \delta n(k) \delta n(k') . \quad (14.11)$$

dove il termine $f(k, k')$ è definito come derivata funzionale seconda, con la, ovvia, proprietà $f(k, k') = f(k', k)$. Ho indicato come ϵ_k^0 l'energia di quasi-particella in assenza di interazione.

Fino a questo momento ho trascurato la presenza dello spin delle quasi-particelle. Come abbiamo visto possono essere equiparate a fermioni, e mi limiterò a trattare il caso di spin 1/2, indicando con s il valore della terza componente. In questo caso il sistema non è più omogeneo dato che l'orientamento degli spin definisce una precisa direzione dello spazio. Per questo motivo, tutte le quantità che ho precedentemente definito come dipendenti solo da k adesso devono essere considerate dipendenti da \mathbf{k} e s , e le somme su k evolvono in somme su \mathbf{k} e $s = \pm 1/2$. Nello specifico abbiamo che $f(k, k') \rightarrow f(\mathbf{k}, s; \mathbf{k}', s')$ e le proprietà di simmetria diventano

$$f(\mathbf{k}, s; \mathbf{k}', s') = f(-\mathbf{k}, -s; -\mathbf{k}', -s') = f(\mathbf{k}, -s; \mathbf{k}', -s') = f(\mathbf{k}', s'; \mathbf{k}, s) . \quad (14.12)$$

È evidente che, fissati \mathbf{k} e \mathbf{k}' , le sole differenze tra le interazioni sono dovute al fatto che gli spin siano paralleli oppure antiparalleli. Per questo motivo è conveniente definire termini simmetrici e antisimmetrici dell'interazione come

$$f(\mathbf{k}, s; \mathbf{k}', s) = f^s(\mathbf{k}, \mathbf{k}') + f^a(\mathbf{k}, \mathbf{k}') , \quad (14.13)$$

$$f(\mathbf{k}, s; \mathbf{k}', -s) = f^s(\mathbf{k}, \mathbf{k}') - f^a(\mathbf{k}, \mathbf{k}') . \quad (14.14)$$

I termini f^a ed f^s dipendono solo dai vettori \mathbf{k} e \mathbf{k}' , quindi dai moduli dei due vettori e dall'angolo tra loro. Per questo motivo possono essere sviluppati in somma di polinomi di Legendre P_l

$$f^{s(a)}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = f^{s(a)}(k, k', \cos\theta) = \sum_l f_l^{s(a)}(k, k') P_l(\cos\theta) . \quad (14.15)$$

Dato che le quasi-particelle sono definite sulla superficie di Fermi si ha che $k = k' = k_F$, quindi si elimina la dipendenza dai moduli dei numeri d'onda nei coefficienti f_l . Le dimensioni dei coefficienti f_l sono quelle di un'energia. Si preferisce far uso di coefficienti a-dimensionali moltiplicando gli f_l per la densità degli stati alla superficie di Fermi

$$F_l \equiv \rho_\epsilon(\epsilon_F) f_l = \frac{\mathcal{V} \mathcal{D} k_F}{2\pi^2 \hbar^2} m^* f_l , \quad (14.16)$$

dove ho usato l'espressione (2.64) della densità degli stati

$$\rho_\epsilon(\epsilon_F) = \frac{\mathcal{V}\mathcal{D}}{4\pi^2} \left(\frac{2m^*}{\hbar^2} \right)^{3/2} \epsilon_F^{1/2} = \frac{\mathcal{V}\mathcal{D}}{2\pi^2} \frac{m^*}{\hbar^2} k_F . \quad (14.17)$$

Le quantità \mathcal{V} e \mathcal{D} , definite nel Cap. 2.3, sono, rispettivamente, il volume del sistema e la degenerazione dei fermioni, che in questo capitolo sarà solo quella di spin, quindi $\mathcal{D} = 2$. Dato che stiamo parlando di quasi-particelle, ho indicato con m^* la loro massa effettiva.

L'utilità della teoria consiste nel fatto che è sufficiente utilizzare solo pochi F_l per ottenere una buona descrizione delle caratteristiche fisiche del sistema fermionico da studiare. I valori di F_l sono determinati per riprodurre pochi dati empirici. Con questi pochi parametri la teoria permette di fare previsioni indipendenti su altri osservabili.

14.4 Proprietà all'equilibrio

14.4.1 Massa effettiva e calore specifico

Possiamo definire la velocità della quasi-particella utilizzando le analogie con le particelle libere. In quest'ultimo caso le energie sono date dalle energie cinetiche $mv^2/2$. In questa analogia, la componente cartesiana α della velocità può essere scritta come

$$(v_k)_\alpha = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial \epsilon_{\mathbf{k}}}{\partial k_\alpha} , \quad (14.18)$$

e quindi, per un sistema isotropo si ha che

$$|\mathbf{v}_k| \equiv v_{\mathbf{k}} = \frac{\hbar k}{m^*} \quad (14.19)$$

In principio m^* dipende da k , ma come ho già discusso, noi consideriamo le quasi-particelle sulla superficie di Fermi, quindi siamo interessati ad un preciso valore di m^* . Il dato empirico al quale colleghiamo il valore della massa effettiva è il calore specifico per unità di volume, che è definito come la variazione dell'energia interna del sistema vedi l'equazione (2.72) diviso per il volume

$$c_v = \frac{1}{\mathcal{V}} C_v = \frac{1}{\mathcal{V}} \frac{\partial E}{\partial T} . \quad (14.20)$$

Considerando variazioni di temperatura tali che $T/T_F \ll 1$ la fluttuazione di energia può essere espressa come

$$\delta E = \sum_{\mathbf{k}, s} \epsilon_{\mathbf{k}, s} \delta n(\mathbf{k}, s) . \quad (14.21)$$

Un aumento della temperatura genera un aumento del numero di quasi-particelle dell'ordine di $\delta n(\mathbf{k}, s)$. In principio esiste anche un aumento dell'energia E dovuto all'interazione tra le quasi-particelle, ma questo aumento è dell'ordine di $(T/T_F)^3$ e, per l'ipotesi fatta sulla validità dell'approccio, si può trascurare.

Per l'equazione (14.21), posso affermare che il calore specifico di un sistema reale può essere descritto come quello di un gas ideale di quasi-particelle non interagenti. Si può quindi ripetere il calcolo fatto nel Cap. 2.3 con l'idea che, al posto delle particelle, si considerano quasi-particelle, con massa m^* . Uso l'espressione (2.74) ottenendo

$$c_v = \frac{1}{\mathcal{V}} C_v = \frac{1}{\mathcal{V}} k_B^2 T \rho_\epsilon(\epsilon_F) \frac{\pi^2}{3} = \frac{1}{2} \mathcal{D} \frac{m^* k_F}{3} k_B^2 T \quad (14.22)$$

dove ho usato l'espressione (14.17) della densità degli stati. Il valore della massa effettiva delle quasi-particelle può essere ottenuto misurando il calore specifico del sistema di fermioni interagenti.

14.4.2 Velocità del suono e compressibilità

Nell'appendice D.3 si mostra la relazione tra la velocità del suono v_s in un fluido ed il modulo di compressione B

$$v_s = \sqrt{\frac{B}{m\rho}} . \quad (14.23)$$

Per ottenere la velocità del suono è necessario calcolare il modulo di compressione definito come nell'equazione (2.60)

$$B = \frac{1}{K} = -\mathcal{V} \frac{\partial P}{\partial \mathcal{V}} . \quad (14.24)$$

Poiché la pressione è legata alla variazione dell'energia rispetto alla variazione di volume, è necessario calcolare le variazioni dell'energia. A questo scopo, supponiamo che l'energia E dello stato fondamentale del sistema sia una funzione \mathcal{F} della densità di particelle

$$E = \mathcal{V} \mathcal{F}(\rho) = \mathcal{V} \mathcal{F} \left(\frac{A}{\mathcal{V}} \right) . \quad (14.25)$$

$$\frac{\partial \rho}{\partial \mathcal{V}} = A \left(\frac{-1}{\mathcal{V}^2} \right) = \frac{-1}{\mathcal{V}} \rho , \quad (14.26)$$

la pressione può essere espressa come

$$P = -\frac{\partial E}{\partial \mathcal{V}} = - \left[\mathcal{F} - \rho \frac{\partial \mathcal{F}}{\partial \rho} \right] , \quad (14.27)$$

e quindi la variazione della pressione diventa

$$\begin{aligned} \frac{\partial P}{\partial \mathcal{V}} &= - \left[\frac{\partial \mathcal{F}}{\partial \rho} \frac{\partial \rho}{\partial \mathcal{V}} - \frac{\partial \rho}{\partial \mathcal{V}} \frac{\partial \mathcal{F}}{\partial \rho} - \rho \frac{\partial}{\partial \rho} \left(\frac{\partial \mathcal{F}}{\partial \rho} \right) \frac{\partial \rho}{\partial \mathcal{V}} \right] \\ &= - \frac{\rho^2}{\mathcal{V}} \frac{\partial^2 \mathcal{F}}{\partial \rho^2} , \end{aligned} \quad (14.28)$$

e il modulo di compressione può essere espresso come

$$B = \rho^2 \frac{\partial^2 \mathcal{F}}{\partial \rho^2} . \quad (14.29)$$

Uso l'espressione (14.25) nella definizione del potenziale chimico

$$\mu = \frac{\partial E}{\partial A} = \frac{\partial}{\partial A} [\mathcal{V} \mathcal{F}] = \frac{\partial \mathcal{F}}{\partial \rho} . \quad (14.30)$$

La variazione del potenziale chimico è

$$\frac{\partial \mu}{\partial A} = \frac{\partial}{\partial \rho} \left(\frac{\partial \mathcal{F}}{\partial \rho} \right) \frac{\partial \rho}{\partial A} = \frac{\partial^2 \mathcal{F}}{\partial \rho^2} \frac{1}{\mathcal{V}} \quad (14.31)$$

Usando l'espressione della derivata seconda di \mathcal{F} nell'espressione (14.29) ottengo

$$B = A \rho \frac{\partial \mu}{\partial A} , \quad (14.32)$$

e per la velocità del suono

$$v_s^2 = \frac{B}{m\rho} = \frac{A}{m} \frac{\partial \mu}{\partial A} . \quad (14.33)$$

Calcolerò l'espressione $\partial A/\partial\mu$ usando la teoria dei liquidi di Fermi. Nel riquadro qui sotto mostro come A sia legato alla variazione di $n(k)$ dall'espressione

$$dA = \sum_{\mathbf{k},s} \delta n(\mathbf{k}, s) = \sum_{\mathbf{k},s} \delta(\epsilon_F - \mu) \hbar v_{k_F} dk_F . \quad (14.34)$$

Derivazione della (14.34).

$$\delta n(\mathbf{k}, s) = -\frac{dn^0(\mathbf{k}, s)}{d\epsilon_k} \frac{\partial \epsilon_k}{\partial k} dk . \quad (14.35)$$

Al termine di questo calcolo della variazione attuerò il limite $k \rightarrow k_F$. Considero

$$d\epsilon_k = d\left(\frac{\hbar^2 k^2}{2m}\right) = \hbar \frac{\hbar k}{m} dk = \hbar \frac{mv_k}{m} dk = \hbar v_k dk \quad (14.36)$$

Considero adesso la variazione di $n^T(k, s)$ per uno stato eccitato, quindi $T > 0$. Dato che il sistema è composto da fermioni, $n^T(\mathbf{k}, s)$ è una distribuzione di Fermi-Dirac

$$n^T(\mathbf{k}, s) = \left[\exp\left(\frac{\epsilon - \mu}{k_B T}\right) + 1 \right]^{-1} , \quad (14.37)$$

quindi

$$\frac{n^T(\mathbf{k}, s)}{d\epsilon} = \frac{-\frac{1}{k_B T} \exp[(\epsilon - \mu)/(k_B T)]}{\{\exp[(\epsilon - \mu)/(k_B T)] + 1\}^2} . \quad (14.38)$$

Nel limite per $T \rightarrow 0$, quindi per lo stato fondamentale, la distribuzione di Fermi-Dirac si trasforma in una funzione gradino Θ , quella mostrata nella Fig. 14.1. Per la proprietà della distribuzione di Dirac δ , $d\Theta/dx = \delta(x)$, ho che

$$\lim_{T \rightarrow 0} \frac{n^T(\mathbf{k}, s)}{d\epsilon} = -\delta(\epsilon - \mu) , \quad (14.39)$$

quindi sulla superficie di Fermi

$$\delta n(\mathbf{k}_F, s) = \delta(\epsilon_F - \mu) \hbar v_{k_F} dk_F . \quad (14.40)$$

Una quasi-particella aggiunta al sistema sulla nuova energia di Fermi deve avere una energia $\epsilon(\mu + d\mu)$ che soddisfa

$$d\mu = \epsilon(\mu + d\mu) - \epsilon(\mu) = \hbar v_{k_F} dk_F + \sum_{\mathbf{k}', s'} f(\mathbf{k}, s; \mathbf{k}', s') \delta n(\mathbf{k}', s') \quad (14.41)$$

Usando l'espressione (14.40) ottengo

$$\frac{\partial \mu}{\partial \mu} = 1 = \hbar v_{k_F} \frac{\partial k_F}{\partial \mu} + \sum_{\mathbf{k}', s} f(\mathbf{k}, s; \mathbf{k}', s) \delta(\epsilon_{k'} - \mu) \hbar v_{k'} \frac{\partial k'}{\partial \mu} . \quad (14.42)$$

Il calcolo della somma in \mathbf{k}' e s' è presentato nel riquadro.

Trasformo la somma in integrale utilizzando le convenzioni presentate nella sezione 2.3.

$$\begin{aligned}
& \sum_{\mathbf{k}', s'} f(\mathbf{k}, s; \mathbf{k}', s') \delta(\epsilon_{k'} - \mu) \hbar v_{k'} \frac{\partial k'}{\partial \mu} \\
&= \sum_{s'} \frac{\mathcal{V}}{(2\pi)^3} \int d^3 k' f(\mathbf{k}, s; \mathbf{k}', s') \delta(\epsilon_{k'} - \mu) \hbar v_{k'} \frac{\partial k'}{\partial \mu} \\
&= \frac{\mathcal{V}}{(2\pi)^3} \sum_{s'} \int dk' k'^2 \int_{-1}^1 d(\cos \theta) \int_0^{2\pi} d\phi f(\mathbf{k}, s; \mathbf{k}', s') \delta(\epsilon_{k'} - \mu) \hbar v_{k'} \frac{\partial k'}{\partial \mu}
\end{aligned}$$

Dato che la variazione tra ϵ_{k_F} e μ è molto piccola posso scrivere, considerando che sto descrivendo un sistema di quasi-particelle di massa effettiva m^*

$$\epsilon_k - \mu|_{k=k_F} \simeq d\epsilon_k|_{k=k_F} = d\left(\frac{\hbar^2 k^2}{2m^*}\right)_{k=k_F} = \frac{\hbar^2 k_F}{m^*} dk_F \simeq \frac{\hbar^2 k_F}{m^*} (k - k_F) ,$$

per la proprietà della distribuzione δ di Dirac

$$\delta(ax) = \frac{1}{|a|} \delta(x) ,$$

posso sostituire nell'integrale

$$\delta(\epsilon_k' - \mu) = \frac{m^*}{\hbar^2 k_F} \delta(k' - k_F)$$

che diventa

$$\begin{aligned}
& \sum_{\mathbf{k}', s'} f(\mathbf{k}, s; \mathbf{k}', s') \delta(\epsilon_{k'} - \mu) \hbar v_{k'} \frac{\partial k'}{\partial \mu} \\
&= \frac{\mathcal{V} 2\pi}{(2\pi)^3} \sum_{s'} \int dk' k'^2 \int_{-1}^1 d(\cos \theta) f(\mathbf{k}, s; \mathbf{k}', s') \frac{m^*}{\hbar^2 k_F} \delta(k' - k_F) \hbar v_{k'} \frac{\partial k'}{\partial \mu} \\
&= \frac{\mathcal{V}}{4\pi^2} \frac{m^* k_F^2}{\hbar^2 k_F} \hbar v_{k_F} \frac{\partial k_F}{\partial \mu} \int_{-1}^1 d(\cos \theta) [f(\mathbf{k}_F, s; \mathbf{k}_F, s) + f(\mathbf{k}, s; \mathbf{k}_F, -s)] .
\end{aligned}$$

Uso le espressioni simmetriche dell'interazione, da (14.13) e (14.14). Quindi considero che sulla superficie di Fermi l'interazione dipende solo dall'angolo tra \mathbf{k} e \mathbf{k}' i cui moduli sono k_F , quindi posso utilizzare lo sviluppo in polinomi di Legendre (14.15). Per questi calcoli ottengo

$$\begin{aligned}
& \sum_{\mathbf{k}', s'} f(\mathbf{k}, s; \mathbf{k}', s') \delta(\epsilon_{k'} - \mu) \hbar v_{k'} \frac{\partial k'}{\partial \mu} \\
&= \frac{\mathcal{V}}{4\pi^2} \frac{m^*}{\hbar^2} k_F \hbar v_{k_F} \frac{\partial k_F}{\partial \mu} \int_{-1}^1 d(\cos \theta) 2 \sum_l f_l^s(k_F, k_F) P_l(\cos \theta) .
\end{aligned}$$

Usando l'ortogonalità dei polinomi di Legendre

$$\int_{-1}^1 dx P_l(x) = 2\delta_{l,0} ,$$

ottengo

$$\sum_{\mathbf{k}', s'} f(\mathbf{k}, s; \mathbf{k}', s') \delta(\epsilon_{k'} - \mu) \hbar v_{k'} \frac{\partial k'}{\partial \mu} = \frac{\mathcal{V}}{\pi^2} \frac{m^*}{\hbar^2} k_F \hbar v_{k_F} \frac{\partial k_F}{\partial \mu} f_0^s(k_F, k_F) .$$

Inserisco il risultato del riquadro nella (14.42), poi uso l'espressione (14.17) della densità degli stati, e la definizione (14.16) dei coefficienti di Landau a-dimensionali

$$\begin{aligned} 1 &= \hbar v_{k_F} \frac{\partial k_F}{\partial \mu} + \frac{\mathcal{V}}{\pi^2} \frac{m^* k_F}{\hbar^2} \hbar v_{k_F} \frac{\partial k_F}{\partial \mu} f_0^s(k_F, k_F) \\ &= \hbar v_{k_F} \frac{\partial k_F}{\partial \mu} + \rho_\epsilon(\epsilon_F) f_0^s(k_F, k_F) \hbar v_{k_F} \frac{\partial k_F}{\partial \mu} = \hbar v_{k_F} \frac{\partial k_F}{\partial \mu} [1 + F_0^s] . \end{aligned} \quad (14.43)$$

Dalla (14.34) ottengo

$$\frac{\partial A}{\partial \mu} = \sum_{\mathbf{k}, s} \delta(\epsilon_F - \mu) \hbar v_{k_F} \frac{\partial k_F}{\partial \mu} \quad (14.44)$$

Usando la definizione (14.33) di velocità del suono, considerando che la somma su $\delta(\epsilon_k - \mu)$ è la densità degli stati ρ_ϵ e il risultato dell'equazione di sopra ottengo

$$\frac{A}{m v_s^2} = \frac{\rho_\epsilon(\epsilon_F)}{1 + F_0^s} , \quad (14.45)$$

da cui

$$v_s^2 = \frac{A}{m} \frac{\pi^2 \hbar^2}{\mathcal{V} m^* k_F} (1 + F_0^s) = \frac{\pi^2 \hbar^2}{\mathcal{V} m^* k_F} \rho (1 + F_0^s) = \frac{\pi^2 \hbar^2}{\mathcal{V} m^* k_F} \left(\frac{k_F^3}{3\pi^2} \right) (1 + F_0^s) = \frac{\hbar^2 k_F^2}{3 m m^*} (1 + F_0^s) \quad (14.46)$$

Da notare la presenza contemporanea delle due masse, la massa della particella m e della quasi-particella. La prima massa è inserita per la definizione di densità di massa del fluido; tradizionale meccanica statistica. La seconda è invece la massa effettiva della quasi-particella che tiene conto del fatto che l'interazione tra le particelle modifica la densità degli stati. Ovviamente l'interazione entra nell'espressione della velocità del suono anche con il termine F_0^s . A parità di tutte le altre variabili, se $F_0^s > 0$ cioè se questa parte dell'interazione è repulsiva, la velocità del suono aumenta, come ci si può aspettare intuitivamente. D'altra parte, valori di $F_0^s < -1$ generano velocità del suono immaginarie. In questo caso le fluttuazioni della densità si sommano e generano instabilità del sistema.

14.4.3 Suscettibilità magnetica

Un altro osservabile utilizzato per determinare i parametri liberi della teoria di Landau è la suscettibilità magnetica χ_M di un liquido di Fermi. In presenza di un campo magnetico \mathbf{H} una particella modifica la propria energia di un fattore $-g\mu_B s|\mathbf{H}|$, dove g è il fattore di Landé, che considererò uguale a 2, e $\mu_B = e\hbar/mc$ il magnetone di Bohr. Considero $s = 1/2$ il caso in cui lo spin dell'elettrone è allineato al campo magnetico \mathbf{H} , e $s = -1/2$ il caso contrario.

Nel caso di un gas reale la modifica dell'energia implica anche un cambio nella distribuzione $n(\mathbf{k}, s)$. Il sistema in equilibrio deve avere lo stesso valore del potenziale chimico μ . Questo vuol dire che devo spendere la stessa energia per aggiungere una particella indipendentemente dal valore di s . Siccome le particelle con $s = -1/2$ hanno acquistato energia in presenza del campo magnetico \mathbf{H} la loro superficie di Fermi diminuirà di δk_F . Per le particelle con $s = 1/2$ avviene il contrario, un aumento di δk_F della superficie di Fermi.

Considero il sistema isotropo, quindi $n(\mathbf{k}, s) = n(k, s)$, e la variazione della distribuzione dei momenti è data da

$$\delta n(k, s) = - \left(\frac{\partial n(k, s)}{\partial k} \right)_{k=k_F} \delta k_F = - [-\delta(k - k_F)] (2s) \delta k_F . \quad (14.47)$$

La δ di Dirac è generata dal fatto che, nello stato fondamentale, $n(k, s)$ è una funzione gradino di k , e quindi la sua derivata è proprio la δ di Dirac, si veda il riquadro della sezione 14.4.2. Il termine $2s = \pm 1$ tiene conto dell'aumento o del decremento della superficie di Fermi dovuto alla presenza del campo magnetico.

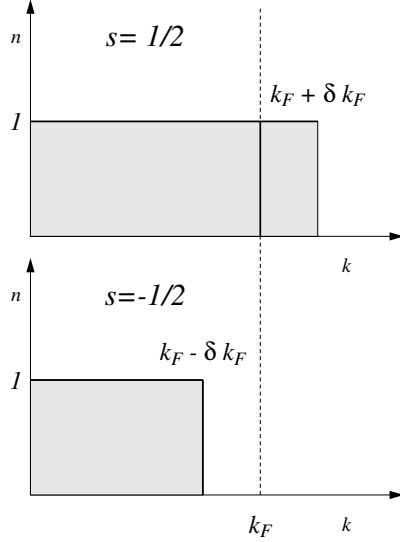


Figura 14.2: Variazione della superficie di Fermi legata alla presenza del campo magnetico \mathbf{H} .

La variazione di energia della quasi-particella è data da

$$\delta\epsilon_{k_F} = -g\mu_B s |\mathbf{H}| + (2s) \sum_{\mathbf{k}', s'} f(\mathbf{k}, s; \mathbf{k}', s') \delta n(\mathbf{k}', s'), \quad (14.48)$$

il termine $2s = \pm 1$ è inserito perché $s = 1/2$ e $s = -1/2$ generano contributi diversi. Cerchiamo, per ipotesi, una soluzione del tipo

$$\delta\epsilon_{k_F} = -\eta s |\mathbf{H}|, \quad (14.49)$$

dove η è una costante da definire. Considero che

$$\frac{d\epsilon_k}{d|\mathbf{k}|} = \frac{\hbar^2 |\mathbf{k}|}{m^*}, \quad (14.50)$$

quindi

$$\delta k_F = \left| \frac{d\epsilon_k}{d|\mathbf{k}|} \right|_{k=k_F}^{-1} |\delta\epsilon_{k_F}| = \frac{m^*}{\hbar^2 k_F} \eta \frac{1}{2} |\mathbf{H}|, \quad (14.51)$$

per $s = 1/2$.

In analogia a quanto fatto nel calcolo della velocità del suono, considero la somma in \mathbf{k}' e s' , e tengo conto del fatto che le distribuzioni $n(k, s)$ (14.47) sono diverse per particelle con spin allineati e antiallineati al campo magnetico. Per effettuare il calcolo uso la strategia utilizzata per il calcolo della velocità del suono: trasformo la somma in integrale utilizzando le convenzioni presentate nella sezione 2.3, uso la definizione dell'interazione antisimmetrica data dalle equazioni (14.13) e (14.14), e lo sviluppo in polinomi di Legendre (14.15). In questo modo ottengo le seguenti espressioni

$$\begin{aligned} & (2s) \sum_{\mathbf{k}', s'} f(\mathbf{k}, s; \mathbf{k}', s') \delta n(\mathbf{k}', s') \\ &= (2s) \sum_{s'=\pm 1/2} \frac{\mathcal{V}}{(2\pi^3)} \int d^3 k' f(\mathbf{k}, s; \mathbf{k}', s') \delta(k' - k_F) (2s') \left[\frac{m^*}{\hbar^2 k_F} \eta \frac{1}{2} |\mathbf{H}| \right] \\ &= \frac{\mathcal{V}}{(2\pi^3)} (2\pi) (2s) \int dk' k'^2 \delta(k' - k_F) \int_{-1}^1 d(\cos \theta) 2f^a(k, k', \cos \theta) \left[\frac{m^*}{\hbar^2 k_F} \eta \frac{1}{2} |\mathbf{H}| \right] \\ &= \frac{\mathcal{V}}{2\pi^2} s \left[\frac{m^*}{\hbar^2 k_F} \eta |\mathbf{H}| \right] \int_{-1}^1 d(\cos \theta) \sum_l f_l^a(k, k') P_l(\cos \theta) \\ &= \frac{\mathcal{V}}{2\pi^2} s \frac{m^*}{\hbar^2 k_F} \eta |\mathbf{H}| k_F^2 f_0^a 2 = F_0^a s \eta |\mathbf{H}| \end{aligned}$$

Inserisco questo risultato nella (14.48) e ottengo

$$\delta\epsilon_{k_F} = -\eta s \frac{1}{2} |\mathbf{H}| = -g\mu_B s |\mathbf{H}| + F_0^a s \eta |\mathbf{H}|, \quad (14.52)$$

da cui

$$\eta[1 + F_0^a] = g\mu_B \quad ; \quad \eta = \frac{g\mu_B}{1 + F_0^a} \quad (14.53)$$

L'energia di magnetizzazione del sistema per unità di volume è data dal prodotto della suscettibilità magnetica χ_M per il modulo del campo magnetico $|\mathbf{H}|$. Questo corrisponde alla somma delle variazioni delle energie di quasi-particella, che hanno campo magnetico $gs\mu_B$, dovuti la modifica della distribuzione $n(\mathbf{k}, s)$ di particelle

$$\begin{aligned} M &= \frac{1}{\mathcal{V}} \chi_M |\mathbf{H}| = \frac{1}{\mathcal{V}} \sum_{\mathbf{k}, s} gs\mu_B \delta n(\mathbf{k}, s) \\ &= \frac{1}{\mathcal{V}} g\mu_B \sum_s s \frac{\mathcal{V}}{(2\pi^3)} \int d^3k \delta(k - k_F) \left[\frac{m^*}{\hbar^2 k_F} (2s) \eta \frac{1}{2} |\mathbf{H}| \right] \\ &= g\mu_B \frac{1}{4\pi^2} \frac{m^* k_F}{\hbar^2} \eta |\mathbf{H}| . \end{aligned}$$

La suscettibilità magnetica per unità di volume è

$$\frac{1}{\mathcal{V}} \chi_M = \frac{M}{|\mathbf{H}|} = \frac{m^* k_F}{4\pi^2 \hbar^2} \frac{(g\mu_B)^2}{1 + F_0^a} \quad (14.54)$$

Le quantità osservabili, calore specifico, velocità del suono e suscettibilità magnetica, permettono di definire i valori empirici dei parametri fondamentali della teoria di Landau: massa effettiva e termini dell'interazione scalare e dipendente dallo spin, termini che ho espresso come parti simmetriche e antisimmetriche dell'interazione. C'è la possibilità di legare questi parametri alla più fondamentale hamiltoniana delle teorie microscopiche a molti corpi, ma l'interesse nell'uso della teoria effettiva è quello di fare previsioni su fenomeni non strettamente legati alle tre quantità osservabili utilizzate per determinare massa effettiva ed interazione.

14.5 Eccitazioni

14.5.1 Equazione di trasporto

Considero un sistema con disomogeneità spaziali, e lo descrivo suddividendolo in piccole unità in equilibrio locale. Ogni unità è composta da un numero sufficientemente grande di particelle in modo da poter definire una funzione di distribuzione $n_{\mathbf{k},s}(\mathbf{r}, t)$, dove \mathbf{r} è il vettore che individua la posizione della sotto unità. Le variazioni spaziali considerate sono su scale molto maggiori di quelle che caratterizzano ogni unità. La presenza di una quantità definita dalla conoscenza precisa dell'impulso $\hbar\mathbf{k}$ e della posizione \mathbf{r} viola il principio di indeterminazione di Heisenberg. La descrizione che stiamo facendo è quindi valida se i fenomeni analizzati sono macroscopici. In altre parole, energie ed impulsi sono molto più piccoli di quelli che caratterizzano le particelle, così come le distanze considerate sono molto più grandi. Ad esempio, le energie tipiche dei liquidi quantistici di elio sono molto più piccole delle energie di eccitazione degli atomi che li compongono.

Consideriamo stati caratterizzati da distribuzioni del tipo

$$n_{\mathbf{k},s}(\mathbf{r}, t) = n_{\mathbf{k},s}^0 + \delta n_{\mathbf{k},s}(\mathbf{r}, t) = n_{\mathbf{k}}^0 + \delta n_{\mathbf{k}}(\mathbf{q}, \omega) e^{i(\mathbf{q}\cdot\mathbf{r} - \omega t)} . \quad (14.55)$$

Il termine $\delta n_{\mathbf{k}}(\mathbf{q}, \omega)$ è l'ampiezza di probabilità di trovare una quasi-particella di impulso \mathbf{q} . La validità dell'approccio è limitato a considerare frequenze ω tali che $\hbar\omega \ll \mu$.

Al tempo t le fluttuazioni dell'energia possono essere espresse come

$$E(t) = E_0 + \sum_{\mathbf{k},s} \int d^3r \epsilon_{k,s} \delta n_{\mathbf{k},s}(\mathbf{r}, t) + \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k},s,\mathbf{k}',s'} \int \int d^3r d^3r' f(\mathbf{r}, \mathbf{k}, s; \mathbf{r}', \mathbf{k}', s') \delta n_{\mathbf{k},s}(\mathbf{r}, t) \delta n_{\mathbf{k}',s'}(\mathbf{r}', t) . \quad (14.56)$$

Faccio delle ipotesi sulle caratteristiche dell'interazione. La prima, di fatto già utilizzata nell'espressione precedente, è che sia indipendente dal tempo. La seconda è legata all'invarianza per trasformazioni di Galileo del sistema di riferimento. Ipotizzo che dipenda esclusivamente dalla distanza $\mathbf{r} - \mathbf{r}'$ tra le particelle. Infine suppongo che sia a corto raggio. Questa ultima ipotesi non include ovviamente le interazioni Coulombiane e liquidi carichi, devono essere trattati con diverse considerazioni. Estremizzando il corto raggio con una forza di contatto considero

$$f(\mathbf{r}, \mathbf{k}, s; \mathbf{r}', \mathbf{k}', s') = f(\mathbf{k}, s; \mathbf{k}', s') \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') , \quad (14.57)$$

quindi il secondo termine della (14.56) può essere scritto come

$$\int \int d^3r d^3r' f(\mathbf{r}, \mathbf{k}, s; \mathbf{r}', \mathbf{k}', s') \delta n_{\mathbf{k},s}(\mathbf{r}, t) \delta n_{\mathbf{k}',s'}(\mathbf{r}', t) = \int d^3r f(\mathbf{k}, s; \mathbf{k}', s') \delta n_{\mathbf{k},s}(\mathbf{r}, t) \delta n_{\mathbf{k}',s'}(\mathbf{r}, t) , \quad (14.58)$$

e

$$E(t) = E_0 + \int d^3r \delta E(\mathbf{r}, t) , \quad (14.59)$$

con

$$\delta E(\mathbf{r}, t) = \sum_{\mathbf{k},s} \epsilon_{k,s} \delta n_{\mathbf{k},s}(\mathbf{r}, t) + \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k},s,\mathbf{k}',s'} f(\mathbf{k}, s; \mathbf{k}', s') \delta n_{\mathbf{k},s}(\mathbf{r}, t) \delta n_{\mathbf{k}',s'}(\mathbf{r}, t) . \quad (14.60)$$

L'energia di eccitazione locale della quasi-particella è definita come

$$\tilde{\epsilon}_{\mathbf{k},s}(\mathbf{r}, t) \equiv \frac{\partial E(\mathbf{r}, t)}{\partial n_{\mathbf{k},s}(\mathbf{r}, t)} = \epsilon_{k,s} + \sum_{\mathbf{k}',s'} f(\mathbf{k}, s; \mathbf{k}', s') \delta n_{\mathbf{k}',s'}(\mathbf{r}, t) . \quad (14.61)$$

Nella trattazione di Landau l'idea è quella di considerare il gas di quasi-particelle come fosse un gas classico, e quindi trattarlo secondo le ipotesi della statistica di Maxwell-Boltzmann. Ad ogni quasi-particella è legata un'hamiltoniana classica che descrive $\tilde{\epsilon}_{\mathbf{k},s}$. Considerando un elemento di volume $d\mathbf{r}$ $d\mathbf{k}$, applichiamo alla distribuzione $n_{\mathbf{k},s}(\mathbf{r}, t)$ l'equazione di trasporto (E.24)

$$\mathcal{I}(n_{\mathbf{k},s}(\mathbf{r}, t)) = \frac{\partial n_{\mathbf{k},s}(\mathbf{r}, t)}{\partial t} + \nabla_{\mathbf{r}} n_{\mathbf{k},s}(\mathbf{r}, t) \cdot \nabla_{\mathbf{p}} \tilde{\epsilon}_{\mathbf{k},s}(\mathbf{r}, t) - \nabla_{\mathbf{p}} n_{\mathbf{k},s}(\mathbf{r}, t) \cdot \nabla_{\mathbf{r}} \tilde{\epsilon}_{\mathbf{k},s}(\mathbf{r}, t) . \quad (14.62)$$

Questa espressione è immediatamente riconducibile alla (E.24) considerando che $\nabla_{\mathbf{p}} \tilde{\epsilon}_{\mathbf{k},s} = \mathbf{v}_{\mathbf{k},s}$ e che $-\nabla_{\mathbf{r}} \tilde{\epsilon}_{\mathbf{k},s}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{F}/m^*$. Esplicito la (14.62) usando le (14.55) e (14.61)

$$\begin{aligned} \mathcal{I}(n_{\mathbf{k},s}(\mathbf{r}, t)) &= \frac{\partial n_{\mathbf{k},s}(\mathbf{r}, t)}{\partial t} + \nabla_{\mathbf{r}} \delta n_{\mathbf{k},s}(\mathbf{r}, t) \cdot \nabla_{\mathbf{p}} \tilde{\epsilon}_{\mathbf{k},s}(\mathbf{r}, t) \\ &\quad - \left\{ \nabla_{\mathbf{p}} [n_{\mathbf{k},s}^0 + \delta n_{\mathbf{k},s}(\mathbf{r}, t)] \cdot \nabla_{\mathbf{r}} [\epsilon_{k,s} + \sum_{\mathbf{k}',s'} f(\mathbf{k}, s; \mathbf{k}', s') \delta n_{\mathbf{k}',s'}(\mathbf{r}, t)] \right\} \\ &= \frac{\partial n_{\mathbf{k},s}(\mathbf{r}, t)}{\partial t} + \nabla_{\mathbf{r}} \delta n_{\mathbf{k},s}(\mathbf{r}, t) \cdot \mathbf{v}_{\mathbf{k},s} - [\nabla_{\mathbf{p}} n_{\mathbf{k},s}^0 + \nabla_{\mathbf{p}} \delta n_{\mathbf{k},s}(\mathbf{r}, t)] \cdot \sum_{\mathbf{k}',s'} f(\mathbf{k}, s; \mathbf{k}', s') \nabla_{\mathbf{r}} \delta n_{\mathbf{k}',s'}(\mathbf{r}, t) \\ &\simeq \frac{\partial n_{\mathbf{k},s}(\mathbf{r}, t)}{\partial t} + \nabla_{\mathbf{r}} \delta n_{\mathbf{k},s}(\mathbf{r}, t) \cdot \mathbf{v}_{\mathbf{k},s} - \nabla_{\mathbf{p}} n_{\mathbf{k},s}^0 \cdot \sum_{\mathbf{k}',s'} f(\mathbf{k}, s; \mathbf{k}', s') \nabla_{\mathbf{r}} \delta n_{\mathbf{k}',s'}(\mathbf{r}, t) \end{aligned} \quad (14.63)$$

dove nell'ultimo passaggio ho trascurato i termini al secondo ordine in $\delta n_{\mathbf{k}}$. I primi due termini descrivono un flusso di quasi-particelle indipendenti l'una dall'altra. L'ultimo termine, che include la loro interazione, può essere interpretato come il flusso delle particelle dello stato fondamentale trascinato dall'interazione con le inhomogeneità della distribuzione delle quasi-particelle. Se δn fosse omogeneo questo termine sarebbe nullo.

14.5.2 Equazione di continuità

Consideriamo il caso in cui l'integrale di collisione sia trascurabile, questo implica che il numero di collisioni tra quasi-particelle che le spostano fuori e dentro il conteggio di $n_{\mathbf{k},s}$ è molto piccolo. Considerando che a temperatura zero

$$\nabla_{\mathbf{p}} n_{\mathbf{k},s}^0 = -\mathbf{v}_{k,s} \delta(\epsilon_{k,s} - \mu) \quad , \quad (14.64)$$

i valori di $\mathbf{p} = \hbar \mathbf{k}$ da considerare sono vicini alla superficie di Fermi. Inserendo l'espressione precedente nell'equazione (14.63) ottengo l'espressione

$$\frac{\partial n_{\mathbf{k},s}(\mathbf{r},t)}{\partial t} + \mathbf{v}_{\mathbf{k}} \delta(\epsilon_{k,s} - \mu) \cdot \nabla_{\mathbf{r}} \left[\delta n_{\mathbf{k},s}(\mathbf{r},t) + \sum_{\mathbf{k}',s'} f(\mathbf{k},s;\mathbf{k}',s') \delta n_{\mathbf{k}',s'}(\mathbf{r},t) \right] = 0 \quad . \quad (14.65)$$

Per ottenere un'equazione che descriva il moto di tutte le particelle del sistema sommo su tutti i valori di \mathbf{k} e di s .

$$\begin{aligned} & \sum_{\mathbf{k},s} \frac{\partial n_{\mathbf{k},s}(\mathbf{r},t)}{\partial t} + \sum_{\mathbf{k},s} \mathbf{v}_{k,s} \cdot \nabla_{\mathbf{r}} \left[\delta n_{\mathbf{k},s}(\mathbf{r},t) + \delta(\epsilon_{k,s} - \mu) \sum_{\mathbf{k}',s'} f(\mathbf{k},s;\mathbf{k}',s') \delta n_{\mathbf{k}',s'}(\mathbf{r},t) \right] \\ &= \frac{\partial}{\partial t} \sum_{\mathbf{k}} n_{\mathbf{k},s}(\mathbf{r},t) + \sum_{\mathbf{k},s} \nabla_{\mathbf{r}} \delta n_{\mathbf{k},s}(\mathbf{r},t) \cdot \mathbf{v}_{k,s} + \sum_{\mathbf{k},s,\mathbf{k}',s'} \delta(\epsilon_{k,s} - \mu) f(\mathbf{k},s;\mathbf{k}',s') \nabla_{\mathbf{r}} \delta n_{\mathbf{k}',s'}(\mathbf{r},t) \cdot \mathbf{v}_{\mathbf{k},s} \\ &= \frac{\partial}{\partial t} \sum_{\mathbf{k},s} n_{\mathbf{k},s}(\mathbf{r},t) + \sum_{\mathbf{k},s} \nabla_{\mathbf{r}} \delta n_{\mathbf{k},s}(\mathbf{r},t) \cdot \mathbf{v}_{k,s} + \sum_{\mathbf{k},s,\mathbf{k}',s'} \delta(\epsilon_{k',s'} - \mu) f(\mathbf{k},s;\mathbf{k}',s') \nabla_{\mathbf{r}} \delta n_{\mathbf{k},s}(\mathbf{r},t) \cdot \mathbf{v}_{k',s'} \\ &= \frac{\partial}{\partial t} \sum_{\mathbf{k}} n_{\mathbf{k},s}(\mathbf{r},t) + \nabla_{\mathbf{r}} \cdot \sum_{\mathbf{k},s} \delta n_{\mathbf{k},s}(\mathbf{r},t) \left[\mathbf{v}_{k,s} + \sum_{\mathbf{k}',s'} \delta(\epsilon_{k',s'} - \mu) f(\mathbf{k},s;\mathbf{k}',s') \mathbf{v}_{k',s'} \right] \\ &= \frac{\partial \rho(\mathbf{r},t)}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{J}(\mathbf{r},t) = 0 \quad , \end{aligned} \quad (14.66)$$

dove abbiamo definito

$$\rho(\mathbf{r},t) = \sum_{\mathbf{k},s} n_{\mathbf{k},s}(\mathbf{r},t) \quad \text{e} \quad \mathbf{J}(\mathbf{r},t) = \sum_{\mathbf{k},s} \delta n_{\mathbf{k},s}(\mathbf{r},t) \left[\mathbf{v}_{k,s} + \sum_{\mathbf{k}',s'} \delta(\epsilon_{k',s'} - \mu) f(\mathbf{k},s;\mathbf{k}',s') \mathbf{v}_{k',s'} \right] \quad . \quad (14.67)$$

Nel calcolo precedente ho considerato che $f(\mathbf{k},s;\mathbf{k}',s') = f(\mathbf{k}',s';\mathbf{k},s)$ e che $|\delta n_{\mathbf{k}',s'}(\mathbf{r},t)| = |\delta n_{\mathbf{k},s}(\mathbf{r},t)|$ poiché le variazioni avvengono sempre alla superficie di Fermi, quindi $|\mathbf{k}| = |\mathbf{k}'| = k_F$.

L'equazione (14.66) è evidentemente un'equazione di continuità e descrive la conservazione del numero di particelle del sistema. La corrente generata dal moto della quasi-particella è

$$\mathbf{j}_{\mathbf{k},s}(\mathbf{r},t) = \mathbf{v}_{k,s} + \sum_{\mathbf{k}',s'} f(\mathbf{k},s;\mathbf{k}',s') \delta(\epsilon_{k,s} - \mu) \mathbf{v}_{k',s'} \quad (14.68)$$

In assenza di interazione la corrente corrisponderebbe a $\mathbf{v}_{k,s}$ come ci si attende da una trattazione classica. Il secondo termine appare perché stiamo descrivendo un sistema interagente. Aggiungendo una

quasi-particella al sistema, accanto all'ovvio contributo della corrente generato da $\mathbf{v}_{k,s}$ c'è il contributo dell'interazione della quasi-particella con tutte le altre presenti nel mezzo. Questo secondo termine, a volte, è chiamato, corrente di trascinamento, come per descrivere il fatto che il mezzo è trascinato dalla quasi-particella aggiunta al sistema.

In un sistema infinito ad invarianza traslazionale posso utilizzare la relazione (14.19) nell'equazione (14.68) per collegare la massa effettiva della quasi-particella alla massa nuda della particella

$$\frac{\hbar k}{m} = \frac{\hbar k}{m^*} + \sum_{\mathbf{k}', s'} f(\mathbf{k}, s; \mathbf{k}', s') \delta(\epsilon_{k,s} - \mu) \mathbf{v}_{k', s'} \quad (14.69)$$

Il calcolo dell'integrale è sviluppato qui sotto.

In questo calcolo come fatto in precedenza, trasformo la somma in integrale utilizzando le convenzioni presentate nella sezione 2.3.

Considero l'asse z parallela a \mathbf{k} senza perdere di generalità. Indico con θ l'angolo tra \mathbf{k} e \mathbf{k}' e $v_{k,s} = |\mathbf{v}_{k,s}|$.

$$\begin{aligned} & \sum_{\mathbf{k}', s'} f(\mathbf{k}, s; \mathbf{k}', s') \delta(\epsilon_{k'} - \mu) v_{k', s'} \cos \theta \\ &= \sum_{s'} \frac{\mathcal{V}}{(2\pi)^3} \int d^3 k' f(\mathbf{k}, s; \mathbf{k}', s) \frac{m^*}{\hbar^2 k} \delta(k' - k_F) v_{k', s'} \cos \theta \\ &= \frac{\mathcal{V}}{(2\pi)^3} \sum_{s'} \int dk' k'^2 \int_{-1}^1 d(\cos \theta) \int_0^{2\pi} d\phi f(\mathbf{k}, s; \mathbf{k}', s) \frac{m^*}{\hbar^2 k} \delta(k' - k_F) v_{k', s'} P_1(\cos \theta) \\ &= \frac{\mathcal{V}}{(2\pi)^3} (2)(2\pi) \frac{m^*}{\hbar^2 k_F} k_F^2 v_{k_F} \int_{-1}^1 d(\cos \theta) \sum_l f_l^s P_l(\cos \theta) P_1(\cos \theta) \\ &= \frac{\mathcal{V} m^* k_F}{2\pi^2} \sum_l f_l^s \int_{-1}^1 dx P_l(x) P_1(x) = F_1^s \frac{1}{2} \frac{2}{3} \delta_{l,1} v_k = \frac{1}{3} v_k F_1^s \end{aligned}$$

dove ho considerato che $v_{k_F, 1/2} = v_{k_F, -1/2} = v_{k_F}$

$$\frac{\hbar k}{m} = \frac{\hbar k}{m^*} + \frac{1}{3} F_1^s v_k = \frac{\hbar k}{m^*} \left(1 + \frac{F_1^s}{3} \right) \quad (14.70)$$

quindi

$$\frac{m^*}{m} = 1 + \frac{F_1^s}{3} \quad (14.71)$$

Piché m^* può essere derivato dalla misura del calore specifico, vedi la sezione 14.4.1, questa relazione fornisce una nuova informazione sulla interazione $f(\mathbf{k}, s; \mathbf{k}', s')$. Notiamo che per $F_1^s \leq -3$ il sistema diventa instabile poiché si otterrebbero masse effettive negative.

14.5.3 Eccitazioni collettive

Supponiamo che il sistema sia stimolato esternamente da una perturbazione periodica di impulso \mathbf{q} e frequenza ω , ad esempio un'onda elettromagnetica con queste caratteristiche. La variazione (14.55) della distribuzione può essere espressa come

$$n_{\mathbf{k},s}(\mathbf{r}, t) = n_{\mathbf{k},s}^0 + \delta n_{\mathbf{k},s}(\mathbf{q}, \omega) e^{i(\mathbf{q} \cdot \mathbf{r} - \omega t)} \quad (14.72)$$

Inserendo questa espressione nella equazione di trasporto (14.63) ottengo

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial t} \left[\delta n_{\mathbf{k},s}(\mathbf{q}, \omega) e^{i(\mathbf{q} \cdot \mathbf{r} - \omega t)} \right] + \nabla_{\mathbf{r}} \left[\delta n_{\mathbf{k},s}(\mathbf{q}, \omega) e^{i(\mathbf{q} \cdot \mathbf{r} - \omega t)} \right] \cdot \mathbf{v}_{\mathbf{k},s} \\ & - \nabla_{\mathbf{p}} n_{\mathbf{k},s}^0 \cdot \sum_{\mathbf{k}',s'} f(\mathbf{k}, s; \mathbf{k}', s') \nabla_{\mathbf{r}} \delta \left[\delta n_{\mathbf{k}',s'}(\mathbf{q}, \omega) e^{i(\mathbf{q} \cdot \mathbf{r} - \omega t)} \right] = 0 \quad . \end{aligned} \quad (14.73)$$

e quindi

$$(\mathbf{q} \cdot \mathbf{v}_{k,s} - \omega) \delta n_{\mathbf{k},s}(\mathbf{q}, \omega) - \nabla_{\mathbf{p}} n_{\mathbf{k},s}^0 \cdot \mathbf{q} \sum_{\mathbf{k}',s'} f(\mathbf{k}, s; \mathbf{k}', s') \delta n_{\mathbf{k}',s'}(\mathbf{q}, \omega) = 0 \quad . \quad (14.74)$$

Per la (14.64) e poiché $\delta(\epsilon_p - \mu) = \delta(k - k_F) m^* / \hbar^2 k_F$

$$(\mathbf{q} \cdot \mathbf{v}_{k,s} - \omega) \delta n_{\mathbf{k},s}(\mathbf{q}, \omega) + \mathbf{v}_{k,s} \cdot \mathbf{q} \delta(\epsilon_{k,s} - \mu) \sum_{\mathbf{k}',s'} f(\mathbf{k}, s; \mathbf{k}', s') \delta n_{\mathbf{k}',s'}(\mathbf{q}, \omega) = 0 \quad . \quad (14.75)$$

Riscrivo la variazione $\delta n_{k,s}$ come

$$n_{\mathbf{k},s}(\mathbf{q}, \omega) = \delta(k - k_F) v_{k_F} u_{\mathbf{k},s} \quad , \quad (14.76)$$

e quindi ottengo l'equazione

$$(\mathbf{q} \cdot \mathbf{v}_{k,s} - \omega) u_{\mathbf{k},s}(\mathbf{q}, \omega) + \mathbf{v}_{k,s} \cdot \mathbf{q} \sum_{\mathbf{k}',s'} f(\mathbf{k}, s; \mathbf{k}', s') u_{\mathbf{k}',s'}(\mathbf{q}, \omega) \quad . \quad (14.77)$$

Senza perdita di generalità, ho scelto l'asse z lungo la direzione di \mathbf{q} . Indico con θ l'angolo tra \mathbf{q} e \mathbf{k} e con θ' l'angolo tra \mathbf{k}' e \mathbf{q} . Utilizzo e uso i simboli q, k, k' per indicare i moduli dei rispettivi vettori. Dato che tutto avviene alla superficie di Fermi $k = k' = k_F$, l'interazione dipende solo dall'angolo tra i due vettori \mathbf{k} e \mathbf{k}' quindi

$$f(\mathbf{k}, s; \mathbf{k}', s') \equiv f[\cos(\theta - \theta'); s, s'] = \frac{\pi^2 \hbar^2}{\mathcal{V} m^*} F[\cos(\theta - \theta'); s, s'] \quad , \quad (14.78)$$

dove ho usato la definizione (14.64) di F . Trasformando nell'equazione (14.77) la somma in integrale secondo le convenzioni nella sezione 2.3, ottengo

$$(qv_{k_F,s} \cos \theta - \omega) u(\theta, \phi, \sigma) + qv_{k_F,s} \frac{\cos \theta}{8\pi} \sum_{s'} \int_0^{2\pi} d\phi' \int_{-1}^1 d(\cos \theta') F[\cos(\theta - \theta'); s, s'] u(\theta', \phi', \sigma') = 0 \quad . \quad (14.79)$$

In analogia a quanto fatto per l'interazione nelle equazioni (14.13) e (14.14) separiamo anche u in una parte simmetrica e antisimmetrica nello spin

$$u(\theta, \phi, \pm 1/2) = u^s(\theta, \phi) \pm u^a(\theta, \phi) \quad (14.80)$$

Inserisco queste definizioni nella (14.79), divido per $qv_{k_F,s}$ e definisco $s = \omega/qv_{k_F,s}$ ottenendo due equazioni simili e indipendenti per u^s e u^a .

$$(\cos \theta - s) u^s(\theta, \phi) + \frac{\cos \theta}{4\pi} \int_0^{2\pi} d\phi' \int_{-1}^1 d(\cos \theta') F^s[\cos(\theta - \theta')] u^s(\theta', \phi') = 0 \quad (14.81)$$

$$(\cos \theta - s) u^a(\theta, \phi) + \frac{\cos \theta}{4\pi} \int_0^{2\pi} d\phi' \int_{-1}^1 d(\cos \theta') F^a[\cos(\theta - \theta')] u^a(\theta', \phi') = 0 \quad (14.82)$$

Una soluzione formale di queste equazioni può essere ottenuta sviluppando le $u^{s,a}(\theta, \phi)$ in serie di armoniche sferiche $Y_{l,\mu}(\theta, \phi)$. L'indipendenza dei termini noti dall'angolo ϕ indica che si ottengono delle equazioni indipendenti ognuna caratterizzata dal numero quantico μ . Questo significa che si possono classificare le soluzioni in base al valore di μ ; $\mu = 0$, longitudinali, $\mu = 1$ trasversali, $\mu = 2$ quadrupolari, ecc. .

Forse il modo di eccitazione più interessante è quello longitudinale simmetrico. Questa situazione descrive un moto di compressione della densità che si propaga lungo \mathbf{q} e che coinvolge allo stesso modo tutte le particelle indipendentemente dalla direzione del loro spin. Si tratta di un modo di eccitazione molto simile a quello della tradizionale propagazione del suono in sistemi classici. Per questo motivo viene denominato *suono zero* (zero sound) contrapposto dal *primo suono* (first sound) che è quello tradizionale descritto nel regime idrodinamico.

Presento un semplice modello per descrivere il *suono zero*. Faccio l'ipotesi che l'interazione sia indipendente da θ e θ' , quindi, nello sviluppo in polinomi di Legendre di $F^s[\cos(\theta - \theta')]$, rimane soltanto il termine F_0^s . Inserendo questa nella (14.81), e sviluppando gli integrali ottengo

$$(\cos \theta - s)u^s(\theta, \phi) + \frac{\cos \theta}{2}F_0^s \int_{-1}^1 d(\cos \theta')u^s(\theta', \phi') = 0 \quad . \quad (14.83)$$

Cerco una soluzione del tipo

$$u^s(\theta, \phi) = C \frac{\cos \theta}{s - \cos \theta} \quad (14.84)$$

con C costante. Inserendola nella (14.83) ottengo

$$\frac{s}{2} \log \frac{s+1}{s-1} = \frac{1}{F_0^s} \quad (14.85)$$

L'integrale da calcolare è

$$\int_{-1}^1 d(\cos \theta) \frac{\cos \theta}{s - \cos \theta} \quad .$$

Dato che

$$\int dx \frac{x}{s-x} = -[x + s \log(x-s)] + \text{costante} \quad ,$$

ottengo

$$(\cos \theta - s)C \frac{\cos \theta}{s - \cos \theta} + \frac{\cos \theta}{2}F_0^s C \{s[\log(s+1) - \log(s-1)] - 2\} = 0 \quad ,$$

da cui ottengo la (14.85).

Nel caso di una interazione repulsiva $F_0^s > 0$ c'è sempre una soluzione reale con $s > 1$. Questo corrisponde alla propagazione di un'onda senza alcun smorzamento, la cui velocità di fase è maggiore di v_{k_F} . Se c'è una debole attrazione tra le quasi-particelle $-1 < F_0^s < 0$, la soluzione della (14.85) è complessa, e la soluzione è un'oscillazione smorzata. Se $F_0^s < -1$ l'attrazione è così forte che l'oscillazione di suono zero è instabile, non si forma.

È importante analizzare le differenze tra zero e primo suono proprio per chiarirne il contenuto fisico. Abbiamo ottenuto l'equazione (14.85) dalla equazione di trasporto (14.63) trascurandone l'integrale di collisione. Questo significa che stiamo considerando una situazione in cui la frequenza di oscillazione della perturbazione ω è molto maggiore di quella delle collisioni elastiche tra le quasi-particelle. Si parla di regime non collisionale. Nel caso più evidente di una interazione repulsiva, il moto collettivo è generato

dall'interazione tra le varie quasi-particelle che produce un certo regime risonante. Le collisioni elastiche smorzano questo comportamento ma sono poche e quindi l'eccitazione collettiva rimane piuttosto stabile.

All'estremo opposto c'è il primo suono che avviene nel cosiddetto regime idrodinamico. In questo caso, la frequenza ω è molto più piccola di quella delle collisioni elastiche tra le quasi-particelle. L'integrale di collisione diventa il termine determinante di tutta la dinamica del sistema. In questa situazione quasi-classica un aumento della densità del sistema implica un aumento del numero di collisioni, perché aumenta la temperatura locale e diminuiscono le distanze. Questo produce un modo di compressione della densità che genera la propagazione del suono. Lo smorzamento è dovuto al grande numero di collisioni elastiche delle particelle che compongono il sistema. Questi processi trasferiscono energia dal modo di eccitazione al sistema in un processo di termalizzazione locale di tipo classico.

Il passaggio tra questi due modi collettivi avviene in una situazione in cui ω è dell'ordine della frequenza dei modi di collisione. In questo caso non si attiva il suono zero perché le collisioni sono troppe e lo smorzamento è immediato. D'altra parte sono troppo poche perché una variazione locale della densità possa produrre un moto collettivo. Nella fase di transizione tra i due suoni si ha un'attenuazione massima della velocità del suono perché nessuno dei due modi di eccitazione è attivo.

L'esistenza del suono zero fu prevista da Landau alla fine degli anni '50 del secolo scorso, ed identificata nel 1966 [Abe66] nell'elio liquido fermionico. L'esperimento fu fatto analizzando l'assorbimento di onde sonore ad una temperatura fissa ed identificando la presenza dei tre regimi, primo suono, transizione, suono zero, descritti sopra.

Parte VI

Appendici

Appendice A

Particelle identiche

In meccanica quantistica le caratteristiche che identificano una particella sono massa, carica elettrica e spin. Particelle con gli stessi valori di queste tre osservabili non sono distinguibili, quindi definite identiche. La descrizione di sistemi composti da particelle indistinguibili in meccanica quantistica è tutt'altro che banale perché deve considerare contemporaneamente tutte le possibili configurazioni di queste particelle compatibili con le osservabili macroscopiche del sistema, come massa, momento angolare e carica elettrica totali.

In questa appendice tratterò il problema delle particelle identiche seguendo la presentazione del capitolo XIV del libro di Cohen-Tannoudji, Diu e Laloë [Coe77].

A.1 Il caso di due particelle

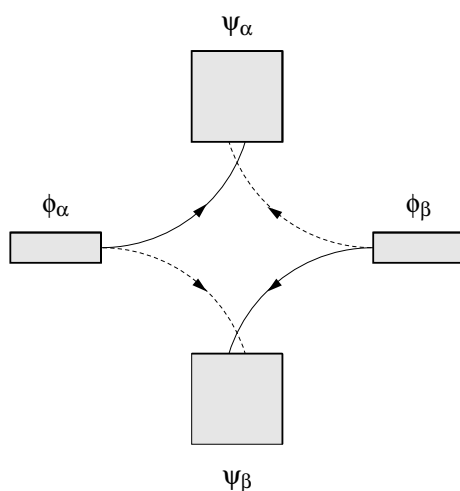


Figura A.1: Particelle prodotte in ϕ_α o ϕ_β possono essere rivelate in ψ_α o in ψ_β .

anche essere avvenuto che la particella prodotta in ϕ_α sia arrivata in ψ_β e quella generata in ϕ_β sia stata rivelata in ψ_α , come segnalato dalle linee tratteggiate. Mentre in meccanica classica è possibile

Nella figura A.1 presento una situazione riguardante un sistema composto da due particelle.

Le scatole rettangolari indicano due sorgenti di particelle, mentre le scatole quadrate i rivelatori. Le particelle, generate dalle sorgenti contrassegnate come ϕ_α e ϕ_β , possono essere identificate dai rivelatori ψ_α e ψ_β . I casi in cui un rivelatore segnala la presenza di entrambe le particelle, e, ovviamente, l'altro non segnala nulla, identificano senza alcuna ambiguità lo stato finale. Viceversa, la situazione in cui entrambi i rivelatori segnalano l'arrivo di una particella è ambigua. Può essere avvenuto che la particella prodotta in ϕ_α sia arrivata in ψ_α e quindi quella prodotta in ϕ_β sia stata rivelata in ψ_β , e questo è indicato dalle linee continue. Ma può

distinguere le due situazioni, non è possibile farlo in meccanica quantistica, dove il concetto di traiettoria non è più applicabile.

La situazione può essere espressa in termini di ampiezza di transizione indicando la situazione con linea continua come

$$\langle \phi_\alpha(1)\phi_\beta(2) | \psi_\alpha(1)\psi_\beta(2) \rangle , \quad (\text{A.1})$$

e quella con la linea tratteggiata come

$$\langle \phi_\alpha(1)\phi_\beta(2) | \psi_\alpha(2)\psi_\beta(1) \rangle , \quad (\text{A.2})$$

che in meccanica quantistica devono coesistere.

Per descrivere questa situazione, è conveniente definire degli operatori di **permutazione** \mathcal{P} che scambiano l'ordine delle due particelle

$$\mathcal{P}(2,1)|\psi_\alpha(1)\psi_\beta(2)\rangle = |\psi_\alpha(2)\psi_\beta(1)\rangle \equiv |\psi_\alpha(2)\rangle|\psi_\beta(1)\rangle = |\psi_\beta(1)\rangle|\psi_\alpha(2)\rangle \equiv |\psi_\beta(1)\psi_\alpha(2)\rangle , \quad (\text{A.3})$$

dove le ultime due uguaglianze sono dovute al fatto che i due spazi di Hilbert costruiti sulle autofunzioni della particella 1 sono indipendenti da quelli definite dalle autofunzioni della particella 2.

Mostro alcune proprietà di questi operatori di permutazione

$$\mathcal{P}^2(2,1) = I , \quad (\text{A.4})$$

come si dimostra applicando ripetutamente i due operatori

$$\mathcal{P}(2,1)\mathcal{P}(2,1)|\psi_\alpha(1)\psi_\beta(2)\rangle = \mathcal{P}(2,1)|\psi_\alpha(2)\psi_\beta(1)\rangle = |\psi_\alpha(1)\psi_\beta(2)\rangle .$$

Inoltre

$$\mathcal{P}^\dagger(2,1) = \mathcal{P}(2,1) , \quad (\text{A.5})$$

infatti

$$\langle \psi_a(1)\psi_b(2) | \mathcal{P}(2,1) | \psi_c(1)\psi_d(2) \rangle = \langle \psi_a(1)\psi_b(2) | \psi_d(1)\psi_c(2) \rangle = \delta_{a,d}\delta_{b,c} , \quad (\text{A.6})$$

$$\begin{aligned} & \langle \psi_a(1)\psi_b(2) | \mathcal{P}^\dagger(2,1) | \psi_c(1)\psi_d(2) \rangle = (\langle \psi_c(1)\psi_d(2) | \mathcal{P}(2,1) | \psi_a(1)\psi_b(2) \rangle)^* \\ & = (\langle \psi_c(1)\psi_d(2) | \mathcal{P}(2,1) | \psi_b(1)\psi_a(2) \rangle)^* = \delta_{a,d}\delta_{b,c} , \end{aligned} \quad (\text{A.7})$$

risultato identico a quello della (A.6).

Poiché

$$\mathcal{P}^\dagger(2,1)\mathcal{P}(2,1) = \mathcal{P}(2,1)\mathcal{P}^\dagger(2,1) = \mathcal{P}^2(2,1) = I , \quad (\text{A.8})$$

\mathcal{P} è unitario quindi gli autovalori che ammette sono soltanto ± 1 .

Definisco stati simmetrici e antisimmetrici, contrassegnati dagli indici S e A rispettivamente, quegli stati tali che

$$\mathcal{P}(2,1)|\psi_S\rangle = |\psi_S\rangle \quad (\text{A.9})$$

$$\mathcal{P}(2,1)|\psi_A\rangle = -|\psi_A\rangle \quad (\text{A.10})$$

Posso definire operatori di proiezione che selezionano le componenti simmetriche e antisimmetriche di un generico stato

$$S = \frac{1}{2} [I + \mathcal{P}(2,1)] \quad ; \quad A = \frac{1}{2} [I - \mathcal{P}(2,1)] , \quad (\text{A.11})$$

Questi operatori hanno le proprietà degli operatori di proiezione,

$$S^2 = \frac{1}{2} [I + \mathcal{P}(2,1)] \frac{1}{2} [I + \mathcal{P}(2,1)] = \frac{1}{4} [I + 2\mathcal{P}(2,1) + \mathcal{P}^2(2,1)] = S , \quad (\text{A.12})$$

e

$$A^2 = \frac{1}{2} [I - \mathcal{P}(2, 1)] \frac{1}{2} [I - \mathcal{P}(2, 1)] = \frac{1}{4} [I - 2\mathcal{P}(2, 1) + \mathcal{P}^2(2, 1)] = A \quad . \quad (\text{A.13})$$

Inoltre

$$SA = \frac{1}{2} [I + \mathcal{P}(2, 1)] \frac{1}{2} [I - \mathcal{P}(2, 1)] = \frac{1}{4} [I - \mathcal{P}(2, 1) + \mathcal{P}(2, 1) - \mathcal{P}^2(2, 1)] = 0 \quad , \quad (\text{A.14})$$

quindi

$$S + A = I \quad . \quad (\text{A.15})$$

Si può dimostrare che gli operatori S e A sono hermitiani

$$S^\dagger = S \quad ; \quad A^\dagger = A \quad . \quad (\text{A.16})$$

Per costruzione, gli autovalori delle parti simmetriche e antisimmetriche di uno stato sono $+1$ e -1 rispettivamente

$$PS|\psi\rangle = P\frac{1}{2} [I + \mathcal{P}(2, 1)] |\psi\rangle = \frac{1}{2} [\mathcal{P}(2, 1) + \mathcal{P}^2(2, 1)] |\psi\rangle = S|\psi\rangle \quad , \quad (\text{A.17})$$

$$PA|\psi\rangle = P\frac{1}{2} [I - \mathcal{P}(2, 1)] |\psi\rangle = \frac{1}{2} [\mathcal{P}(2, 1) - \mathcal{P}^2(2, 1)] |\psi\rangle = -A|\psi\rangle \quad . \quad (\text{A.18})$$

Considero l'azione di un operatore ad un corpo che rappresenta un osservabile

$$B|\psi_\alpha\rangle = b_\alpha|\psi_\alpha\rangle \quad , \quad (\text{A.19})$$

dove b_α è l'autovalore relativo all'autostato $|\psi_\alpha\rangle$. L'operatore osservabile si comporta sotto una permutazione come

$$\begin{aligned} \mathcal{P}(2, 1)B(1)\mathcal{P}^\dagger(2, 1)|\psi_\alpha(1)\psi_\beta(2)\rangle &= \mathcal{P}(2, 1)B(1)|\psi_\alpha(2)\psi_\beta(1)\rangle \\ &= \mathcal{P}(2, 1)b_\beta|\psi_\alpha(2)\psi_\beta(1)\rangle = b_\beta\mathcal{P}(2, 1)|\psi_\alpha(2)\psi_\beta(1)\rangle = b_\beta|\psi_\alpha(1)\psi_\beta(2)\rangle \quad . \end{aligned} \quad (\text{A.20})$$

quindi

$$\mathcal{P}(2, 1)B(1)\mathcal{P}^\dagger(2, 1) = B(2) \quad \text{e} \quad \mathcal{P}(2, 1)B(2)\mathcal{P}^\dagger(2, 1) = B(1) \quad (\text{A.21})$$

Valgono le proprietà

$$\mathcal{P}(2, 1)[B(1) + C(2)]\mathcal{P}^\dagger(2, 1) = B(2) + C(1) \quad , \quad (\text{A.22})$$

e

$$\mathcal{P}(2, 1)[B(1)C(2)]\mathcal{P}^\dagger(2, 1) = \mathcal{P}(2, 1)B(1)\mathcal{P}(2, 1)\mathcal{P}^\dagger(2, 1)C(2)\mathcal{P}^\dagger(2, 1) = B(2)C(1) \quad , \quad (\text{A.23})$$

Per un operatore a due corpi si ha che

$$\mathcal{P}(2, 1)O(1, 2)\mathcal{P}^\dagger(2, 1) = O(2, 1) \quad . \quad (\text{A.24})$$

A.2 Il caso di tre particelle

Definisco un operatore di permutazione \mathcal{P} che agisce sul vettore che descrive lo stato del sistema cambiando l'ordine delle particelle secondo lo schema

$$\mathcal{P}(n, p, q)|\psi_\alpha(1)\psi_\beta(2)\psi_\gamma(3)\rangle = |\psi_\alpha(n)\psi_\beta(p)\psi_\gamma(q)\rangle \quad . \quad (\text{A.25})$$

Gli operatori di permutazione sono

$$\mathcal{P}(1, 2, 3) \quad , \quad \mathcal{P}(3, 1, 2) \quad , \quad \mathcal{P}(2, 3, 1) \quad \text{e} \quad \mathcal{P}(1, 3, 2) \quad , \quad \mathcal{P}(2, 1, 3) \quad , \quad \mathcal{P}(3, 2, 1) \quad . \quad (\text{A.26})$$

Ad esempio

$$\mathcal{P}(2, 3, 1)|\psi_\alpha(1)\psi_\beta(2)\psi_\gamma(3)\rangle = |\psi_\alpha(2)\psi_\beta(3)\psi_\gamma(1)\rangle . \quad (\text{A.27})$$

Definisco **trasposizioni** quelle permutazioni in cui vengono scambiate solo due particelle. Ad esempio $\mathcal{P}(1, 3, 2)$ è una trasposizione poiché solo le particelle 3 e 2 sono scambiate.

Si può dimostrare che ogni permutazione può essere costruita come prodotto di trasposizioni.

Ad esempio, mostro qui sotto che

$$\mathcal{P}(3, 1, 2) = \mathcal{P}(3, 2, 1)\mathcal{P}(2, 1, 3) = \mathcal{P}(1, 3, 2)\mathcal{P}(3, 2, 1) . \quad (\text{A.28})$$

Applico direttamente l'operatore $\mathcal{P}(3, 1, 2)$

$$\mathcal{P}(3, 1, 2)|\psi_\alpha(1)\psi_\beta(2)\psi_\gamma(3)\rangle = |\psi_\alpha(3)\psi_\beta(1)\psi_\gamma(2)\rangle . \quad (\text{A.29})$$

Verifico il risultato dei due diversi modi di esprimere l'operatore di permutazione $\mathcal{P}(3, 1, 2)$ come prodotto di trasposizioni. Nel primo caso ottengo

$$\mathcal{P}(1, 3, 2)\mathcal{P}(3, 2, 1)|\psi_\alpha(1)\psi_\beta(2)\psi_\gamma(3)\rangle = \mathcal{P}(1, 3, 2)|\psi_\alpha(3)\psi_\beta(2)\psi_\gamma(1)\rangle = |\psi_\alpha(3)\psi_\beta(1)\psi_\gamma(2)\rangle , \quad (\text{A.30})$$

e nel secondo

$$\mathcal{P}(3, 2, 1)\mathcal{P}(2, 1, 3)|\psi_\alpha(1)\psi_\beta(2)\psi_\gamma(3)\rangle = \mathcal{P}(3, 1, 1)|\psi_\alpha(2)\psi_\beta(1)\psi_\gamma(3)\rangle = |\psi_\alpha(3)\psi_\beta(1)\psi_\gamma(2)\rangle . \quad (\text{A.31})$$

In generale, gli operatori di permutazione non commutano, ad esempio

$$\mathcal{P}(3, 2, 1)\mathcal{P}(1, 3, 2)|\psi_\alpha(1)\psi_\beta(2)\psi_\gamma(3)\rangle = \mathcal{P}(3, 2, 1)|\psi_\alpha(1)\psi_\beta(3)\psi_\gamma(2)\rangle = |\psi_\alpha(2)\psi_\beta(3)\psi_\gamma(1)\rangle \quad (\text{A.32})$$

che è ha un risultato chiaramente diverso rispetto a quello mostrato nell'equazione (A.30). Quindi

$$\mathcal{P}(1, 3, 2)\mathcal{P}(3, 2, 1) = \mathcal{P}(3, 1, 2) \neq \mathcal{P}(3, 2, 1)\mathcal{P}(2, 1, 3) = \mathcal{P}(2, 3, 1) \quad (\text{A.33})$$

È possibile dimostrare che, per ogni permutazione, il numero di trasposizioni che la determinano può essere soltanto pari oppure dispari. Ad esempio le permutazioni

$$\mathcal{P}(1, 2, 3) , \mathcal{P}(3, 1, 2) , \mathcal{P}(2, 3, 1)$$

possono essere descritte soltanto dall'azione ripetuta di un numero pari di trasposizioni, mentre le permutazioni

$$\mathcal{P}(1, 3, 2) , \mathcal{P}(2, 1, 3) , \mathcal{P}(3, 2, 1)$$

sono descritte da un numero dispari di trasposizioni.

A.3 Generalizzazione a N particelle

Considero un sistema composto da N particelle. Definisco con $\mathcal{P}(\alpha)$ un operatore che effettui una permutazione α delle particelle. In analogia a quanto fatto precedentemente per i sistemi a due o tre corpi, definisco stati simmetrici tali che

$$\mathcal{P}(\alpha)|\psi_S\rangle = |\psi_S\rangle , \quad (\text{A.34})$$

e stati antisimmetrici tali che

$$\mathcal{P}(\alpha)|\psi_A\rangle = \epsilon_\alpha|\psi_A\rangle , \quad (\text{A.35})$$

dove $\epsilon_\alpha = +1$ se il numero di trasposizioni che determina $\mathcal{P}(\alpha)$ è pari, mentre $\epsilon_\alpha = -1$ se questo numero è dispari.

Posso definire due operatori di proiezione che estraggono la parte simmetrica e antisimmetrica dello stato:

$$S = \frac{1}{N!} \sum_{\alpha} \mathcal{P}(\alpha) \quad ; \quad A = \frac{1}{N!} \sum_{\alpha} \epsilon_{\alpha} \mathcal{P}(\alpha) \quad (\text{A.36})$$

In maniera analoga a come è stato fatto per il caso a due particelle, si può dimostrare che gli operatori S e A sono hermitiani

$$S^{\dagger} = S \quad ; \quad A^{\dagger} = A \quad . \quad (\text{A.37})$$

Nell'inserto qui sotto dimostro che

$$\mathcal{P}(\alpha)S = S\mathcal{P}(\alpha) = S \quad ; \quad \mathcal{P}(\alpha)A = A\mathcal{P}(\alpha) = \epsilon_{\alpha}A \quad . \quad (\text{A.38})$$

Poiché

$$\mathcal{P}(\alpha)\mathcal{P}(\beta) = \mathcal{P}(\gamma) \quad ,$$

e

$$\epsilon_{\alpha}\epsilon_{\beta} = \epsilon_{\gamma} \quad ,$$

ottengo

$$\mathcal{P}(\alpha)S = \frac{1}{N!} \sum_{\beta} \mathcal{P}(\alpha)\mathcal{P}(\beta) = \frac{1}{N!} \sum_{\gamma} \mathcal{P}(\gamma) = S \quad ,$$

e, per gli operatori antisimmetrici

$$\mathcal{P}(\alpha)A = \frac{1}{N!} \sum_{\beta} \epsilon_{\beta} \mathcal{P}(\alpha)\mathcal{P}(\beta) = \frac{1}{N!} \sum_{\beta} \epsilon_{\beta} \mathcal{P}(\alpha)\mathcal{P}(\beta) = \frac{1}{N!} \sum_{\beta} \epsilon_{\beta}\epsilon_{\gamma} \mathcal{P}(\gamma) = \epsilon_{\alpha}A \quad .$$

Si ha che $S^2 = S$ e $A^2 = A$ e $AS = SA = 0$. I due proiettori proiettano su spazi totalmente simmetrici o antisimmetrici.

$$\begin{aligned} \mathcal{P}(\alpha)S|\psi\rangle &= S|\psi\rangle \equiv |\psi_S\rangle \\ \mathcal{P}(\alpha)A|\psi\rangle &= \epsilon_{\alpha}A|\psi\rangle \equiv |\psi_A\rangle \quad . \end{aligned} \quad (\text{A.39})$$

Per $N > 2$ S e A non proiettano su spazi supplementari.

A.4 Postulato di simmetrizzazione

In natura osserviamo sistemi di particelle che sono descritti da stati che godono di un solo tipo di simmetria rispetto a loro permutazioni. Gli stati che descrivono sistemi di particelle identiche con spin intero, o nullo, sono simmetrici per ogni operazione di permutazione. Queste particelle sono dette bosoni e soddisfano la statistica di Bose-Einstein. Stati che descrivono sistemi di particelle identiche con spin semi-intero sono antisimmetrici per una loro permutazione. Queste particelle sono dette fermioni perché soddisfano la statistica di Fermi-Dirac.

Particelle identiche composte da altre sottostrutture si comportano come bosoni o fermioni se il loro spin totale è intero o semi-intero, indipendentemente da quale sia lo spin delle sottostrutture che le

compongono. Un esempio clamoroso è quello dell'elio liquido. Se il nucleo di elio che compone l'atomo è un ${}^4\text{He}$, cioè composto da due protoni e due neutroni, lo spin totale dell'atomo è intero, considerando anche lo spin della coppia di elettroni. Il liquido quantistico di ${}^4\text{He}$ ha le caratteristiche del liquido bosonico. Al contrario, se il nucleo di elio è quello dell'isotopo ${}^3\text{He}$ si ottiene un liquido quantistico fermionico.

Uno dei grandi successi della teoria dei campi è la dimostrazione del fatto che la statistica bosonica sia legata a particelle con spin intero, e quella fermionica a particelle con spin semi-intero.

A.5 Diffusione tra due particelle identiche

Riconsidero il caso della diffusione di due particelle identiche presentato nella figura A.1.

Sulla base di quanto descritto in precedenza posso esprimere gli stati iniziali e finali del processo come

$$|\Psi_i\rangle \equiv \frac{1}{\sqrt{2}} [I + \epsilon \mathcal{P}(1, 2)] |\phi_\alpha(1)\phi_\beta(2)\rangle, \quad (\text{A.40})$$

$$|\Psi_f\rangle \equiv \frac{1}{\sqrt{2}} [I + \epsilon \mathcal{P}(1, 2)] |\psi_\alpha(1)\psi_\beta(2)\rangle, \quad (\text{A.41})$$

dove $\epsilon = 1$ se le due particelle sono bosoni e $\epsilon = -1$ nel caso siano fermioni.

Gli stati presentati sopra sono normalizzati ad 1.

$$\begin{aligned} & \langle \phi_\alpha(1)\phi_\beta(2) | \frac{1}{\sqrt{2}} [I + \epsilon \mathcal{P}^\dagger(1, 2)] \frac{1}{\sqrt{2}} [I + \epsilon \mathcal{P}(1, 2)] | \phi_\alpha(1)\phi_\beta(2) \rangle \\ &= \frac{1}{2} \langle \phi_\alpha(1)\phi_\beta(2) | I + \epsilon \mathcal{P}^\dagger(1, 2) + \epsilon \mathcal{P}(1, 2) + \epsilon^2 \mathcal{P}^\dagger(1, 2)\mathcal{P}(1, 2) | \phi_\alpha(1)\phi_\beta(2) \rangle \\ &= \frac{1}{2} \langle \phi_\alpha(1)\phi_\beta(2) | I + 2\epsilon \mathcal{P}(1, 2) + I | \phi_\alpha(1)\phi_\beta(2) \rangle \\ &= \langle \phi_\alpha(1)\phi_\beta(2) | \phi_\alpha(1)\phi_\beta(2) \rangle + \epsilon \langle \phi_\alpha(1)\phi_\beta(2) | \phi_\alpha(2)\phi_\beta(1) \rangle = 1 + 0 \end{aligned}$$

L'ultimo risultato è stato ottenuto considerando che le funzioni ϕ_α sono ortonormalizzate

$$\langle \phi_\alpha | \phi_\beta \rangle = \delta_{\alpha, \beta}$$

Ipotizziamo che il processo sia descritto da un operatore ad un corpo

$$\mathcal{O} = \sum_{i=1,2} \mathcal{O}(i). \quad (\text{A.42})$$

L'ampiezza di transizione può essere descritta come

$$\begin{aligned} \langle \Psi_i | \Psi_f \rangle &= \langle \phi_\alpha(1)\phi_\beta(2) | \frac{1}{\sqrt{2}} [I + \epsilon \mathcal{P}^\dagger(1, 2)] \mathcal{O} \frac{1}{\sqrt{2}} [I + \epsilon \mathcal{P}(1, 2)] | \psi_\alpha(1)\psi_\beta(2) \rangle \\ &= \frac{1}{2} \langle \phi_\alpha(1)\phi_\beta(2) | [\mathcal{O} + \epsilon \mathcal{P}^\dagger(1, 2)\mathcal{O} + \epsilon \mathcal{O}\mathcal{P}(1, 2) + \epsilon^2 \mathcal{P}^\dagger(1, 2)\mathcal{O}\mathcal{P}(2, 1)] | \psi_\alpha(1)\psi_\beta(2) \rangle \\ &= \frac{1}{2} \langle \phi_\alpha(1)\phi_\beta(2) | [2\mathcal{O} + 2\epsilon \mathcal{P}(1, 2)\mathcal{O}] | \psi_\alpha(1)\psi_\beta(2) \rangle \\ &= \langle \phi_\alpha(1)\phi_\beta(2) | \mathcal{O} | \psi_\alpha(1)\psi_\beta(2) \rangle + \epsilon \langle \phi_\alpha(1)\phi_\beta(2) | \mathcal{O} | \psi_\alpha(2)\psi_\beta(1) \rangle \\ &\equiv \langle \phi_\alpha | \mathcal{O} | \psi_\alpha \rangle \langle \phi_\beta | \psi_\beta \rangle + \langle \phi_\alpha | \psi_\alpha \rangle \langle \phi_\beta | \mathcal{O} | \psi_\beta \rangle \\ &\quad + \epsilon [\langle \phi_\alpha | \mathcal{O} | \psi_\beta \rangle \langle \phi_\beta | \psi_\alpha \rangle + \langle \phi_\alpha | \psi_\beta \rangle \langle \phi_\beta | \mathcal{O} | \psi_\alpha \rangle] \end{aligned} \quad (\text{A.43})$$

La probabilità di transizione è data dal modulo quadro dell'ampiezza. Questo implica l'interferenza tra i termini della (A.43).

Per fermioni, nel caso $\phi_\alpha = \phi_\beta$, o anche, $\psi_\alpha = \psi_\beta$ il processo è proibito. Questo fatto è quello che comunemente viene definito come principio di esclusione di Pauli.

A.6 Particelle non interagenti

Nel caso si descriva il sistema trascurando l'interazione tra le particelle l'hamiltoniana può essere espressa come somma di termini che coinvolgono una particella alla volta, si veda il Capitolo 2,

$$H_0 = \sum_i h_i . \quad (\text{A.44})$$

Le hamiltoniane di singola particella h_i hanno autostati di singola particella $|\phi_i\rangle$ e autovalori dell'energia ϵ_i

$$h_i|\phi_i\rangle = \epsilon_i|\phi_i\rangle . \quad (\text{A.45})$$

Una soluzione dell'equazione di Schrödinger è data da uno stato a multicorpi che è il prodotto degli stati di singola particella $|\phi_i\rangle$

$$|\Phi\rangle = \prod_{i=1}^N |\phi_i\rangle . \quad (\text{A.46})$$

Il principio di indistinguibilità implica che lo stato a multicorpi $|\Phi_G\rangle$ deve essere formato da una combinazione lineare di stati tipo (A.46) in cui sono attive tutte le possibili permutazioni delle particelle. I coefficienti della combinazione lineare sono tutti uguali perchè ogni stato $|\Phi\rangle$ è equiprobabile, e ogni permutazione di particelle è simmetrica, quindi

$$|\Phi_G\rangle = \sum_{\alpha} \mathcal{P}(\alpha) |\Phi\rangle = \sum_{\alpha} \mathcal{P}(\alpha) \prod_{i=1}^N |\phi_i\rangle , \quad (\text{A.47})$$

dove la somma in α si estende a tutte le possibili permutazioni e lo stato è definito a meno di una costante moltiplicativa che ne definisce la normalizzazione. Nel caso si desideri una normalizzazione ad 1, il fattore moltiplicativo è $1/\sqrt{N!}$ poiché $N!$ è il numero delle possibili permutazioni. Nello stato fondamentale del sistema, quello con minima energia, tutte le particelle bosoniche occupano lo stesso stato di singola particella $|\phi_0\rangle$ con l'energia più piccola ϵ_0 . In questo caso ogni permutazione riproduce lo stesso stato.

La situazione per i fermioni è più complessa. Nel cercare l'opportuna combinazione lineare di stati di singola particella con tutte le possibili permutazioni, bisogna considerare che tutte le permutazioni che possono essere descritte da un numero dispari di trasposizioni devono avere un fattore moltiplicativo -1, mentre quelle permutazioni descritte da un numero pari di trasposizioni hanno un segno +1. Un modo conveniente per descrivere la soluzione generale di un sistema di fermioni interagenti in termini delle funzioni d'onda di singola particella è quello di utilizzare le proprietà matematiche dei determinanti

$$\Phi_G(x_1 \cdots x_N) = \begin{vmatrix} \phi_{\nu_1}(x_1) & \cdots & \phi_{\nu_N}(x_1) \\ \vdots & & \vdots \\ \phi_{\nu_1}(x_N) & \cdots & \phi_{\nu_N}(x_N) \end{vmatrix} . \quad (\text{A.48})$$

dove con x_i ho indicato tutti i numeri quantici che identificano in maniera univoca la particella i . Anche in questo caso, la definizione di Φ_G è espressa a meno di una costante moltiplicativa che è $1/\sqrt{N!}$ nel

caso si desidera normalizzare ad 1 lo stato. L'espressione (A.48) dello stato del sistema fermionico è noto in letteratura come determinante di Slater.

Per le proprietà del determinante, se due righe, o due colonne sono identiche il determinante è nullo. Questo equivale a dire che se due fermioni occupano lo stesso stato di singola particella, lo stato a multiorp è nullo. Questa è l'usuale formulazione del principio di esclusione di Pauli: due fermioni non possono occupare lo stesso stato quantistico. È quindi evidente come questa formulazione sia che la conseguenza dell'applicazione dell'antisimmetria dello stato fermionico al caso particolare di un sistema di fermioni non interagenti.

Lo stato a multiorp con energia minima è descritto occupando tutti i possibili stati di singola particella $|\phi_i\rangle$ partendo da quello con energia minima ed incrementando man mano l'energia in modo da sistemare tutti gli N fermioni. Lo stato di massima energia è chiamato livello di Fermi, e la sua energia energia di Fermi.

Appendice B

Principio variazionale

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

$$H|\Psi\rangle = E|\Psi\rangle , \quad (\text{B.1})$$

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

$$\delta E[\Psi] = \delta \frac{\langle \Psi | H | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle} = 0 , \quad (\text{B.2})$$

corrisponde alla soluzione dell'equazione di Schrödinger (B.1).

Riscriviamo la definizione dell'energia definita in (B.2) come

$$E[\Psi] \langle \Psi | \Psi \rangle = \langle \Psi | H | \Psi \rangle , \quad (\text{B.3})$$

e facciamo la variazione

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

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

$$\delta (\langle \Psi | H | \Psi \rangle) - E[\Psi] \delta (\langle \Psi | \Psi \rangle) = 0 , \quad (\text{B.4})$$

e poiché E è un numero

$$\langle \delta \Psi | H - E | \Psi \rangle + \langle \Psi | H - E | \Psi \delta \rangle = 0 . \quad (\text{B.5})$$

Dato che Ψ è una 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 (B.5) $|i\delta\Psi\rangle$ a $|\delta\Psi\rangle$.

$$-i\langle \delta\Psi | H - E | \Psi \rangle + i\langle \Psi | H - E | \Psi \delta \rangle = i[-\langle \delta\Psi | H - E | \Psi \rangle + \langle \Psi | H - E | \Psi \delta \rangle] = 0 . \quad (\text{B.6})$$

Poiché le equazioni (B.5) e (B.6) devono essere verificate contemporaneamente si ha che

$$\langle \delta\Psi | H - E | \Psi \rangle = 0 \quad \text{e} \quad \langle \Psi | H - E | \delta\Psi \rangle = 0 . \quad (\text{B.7})$$

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

$$[H - E]|\Psi\rangle = 0 \quad , \quad (\text{B.8})$$

che corrisponde all'equazione di Schrödinger (B.1).

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

$$|\Phi\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} D_n |\Psi_n\rangle \quad (\text{B.9})$$

espressa come combinazione lineare degli autostati di H

$$H|\Psi_n\rangle = E_n |\Psi_n\rangle \quad (\text{B.10})$$

dove D_n sono numeri complessi.

Il funzionale dell'energia può essere espresso come

$$\begin{aligned} E[\Phi] &= \frac{\langle \Phi | H | \Phi \rangle}{\langle \Phi | \Phi \rangle} = \frac{\sum_{n,n'} \langle \Psi_{n'} | D_{n'}^* H D_n | \Psi_n \rangle}{\sum_{n,n'} \langle \Psi_{n'} | D_{n'}^* D_n | \Psi_n \rangle} \\ &= \frac{\sum_{n,n'} D_{n'}^* D_n \langle \Psi_{n'} | H | \Psi_n \rangle}{\sum_{n,n'} D_{n'}^* D_n \langle \Psi_{n'} | \Psi_n \rangle} = \frac{\sum_{nn'} D_{n'}^* D_n E_n \delta_{n,n'}}{\sum_n |D_n|^2} \geq \frac{\sum_n |D_n|^2 E_0}{\sum_n |D_n|^2} = E_0 \quad . \end{aligned} \quad (\text{B.11})$$

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 .

Appendice C

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:

$$a_{j,m}^+|0\rangle = |jm\rangle \quad (\text{C.1})$$

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:

$$[J_z, a_{j,m}^+] = m a_{j,m}^+ \quad (\text{C.2})$$

$$[J_{\pm}, a_{j,m}^+] = [j(j+1) - m(m \pm 1)]^{1/2} a_{j,m \pm 1}^+, \quad (\text{C.3})$$

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:

$$(T_q^k)^+ = (T_{-q}^k) (-)^q. \quad (\text{C.4})$$

Questo significa che l'aggiunto di $a_{j,m}^+$, $a_{j,m}$, non è componente di un tensore sferico irriducibile, ma lo è invece

$$\tilde{a}_{j,m} = (-)^{j+m} a_{j,-m} \quad (\text{C.5})$$

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:

$$\{a_{j,m}^+, a_{j,m'}^+\} = 0 \quad \{\tilde{a}_{j,m}, \tilde{a}_{j',m'}\} = 0 \quad (\text{C.6})$$

$$\{\tilde{a}_{j,m}, a_{j',m'}^+\} = (-)^{j+m} \delta_{j,j'} \delta_{-m,m'} \quad (\text{C.7})$$

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:

$$A^+(j_1 j_2; JM) = \frac{1}{(1 + \delta_{j_1 j_2})^{1/2}} [a_{j_1}^+ \otimes a_{j_2}^+]_M^J \quad (\text{C.8})$$

dove abbiamo definito:

$$[a_{j_1}^+ \otimes a_{j_2}^+]_M^J = \sum_{m_1 m_2} \langle j_1 m_1 j_2 m_2 | JM \rangle a_{j_1, m_1}^+ a_{j_2, m_2}^+ \quad (\text{C.9})$$

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:

$$\tilde{A}(j_1 j_2; JM) = (-)^{J+M} [A^+(j_1 j_2; J - M)]^+ = -\frac{1}{(1 + \delta_{j_1 j_2})^{1/2}} [\tilde{a}_{j_1} \otimes \tilde{a}_{j_2}]_M^J \quad (\text{C.10})$$

e l'operatore di creazione di una coppia particella-buca è:

$$U(j_1 j_2 JM) = [a_{j_1}^+ \otimes \tilde{a}_{j_2}]_M^J \quad (\text{C.11})$$

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 .

Appendice D

Velocità del suono nei fluidi

In questa appendice ricavo l'espressione che lega la velocità del suono in un fluido classico. La trattazione è tradizionale [Blu06], si considerano fluidi classici, non quantistici, e si combinano le equazioni di continuità e di Eulero. In questa sezione $\mathbf{u}(\mathbf{r}, t)$ rappresenta la velocità locale di una massa infinitesima di fluido, e ρ_m la densità di massa legata alla densità di numero dalla relazione $\rho_m = m\rho$ dove m è la massa della particella di cui ρ rappresenta la probabilità che esista nell'unità di volume.

D.1 Equazione di continuità

La massa di un fluido che, nell'unità di tempo, esce da una superficie chiusa S è data da

$$\int_S \rho_m \mathbf{u} \cdot d\mathbf{S} , \quad (\text{D.1})$$

dove l'integrale è di superficie e la direzione di $d\mathbf{S}$ è data da un vettore ortogonale al piano tangente l'elemento infinitesimo di superficie. La perdita di flusso implica una diminuzione della concentrazione del fluido nel volume racchiuso dalla superficie S

$$\int_S \rho_m \mathbf{u} \cdot d\mathbf{S} = - \frac{\partial}{\partial t} \int_V \rho_m dV \quad (\text{D.2})$$

dove l'integrale a destra dell'uguale è un integrale di volume. Questa è l'equazione di continuità in forma integrale. Per ottenere l'espressione di questa equazione in forma differenziale applico il teorema della divergenza al termine di sinistra

$$\int_S \rho_m \mathbf{u} \cdot d\mathbf{S} = \int_V \rho_m \nabla \cdot \mathbf{u} dV = - \int_V \frac{\partial \rho_m}{\partial t} dV , \quad (\text{D.3})$$

dove ho anche invertito l'ordine delle operazioni di integrazione e differenziazione nell'ultimo integrale. Eguagliando i termini integrandi ottengo

$$\nabla \cdot (\rho_m \mathbf{u}) = - \frac{\partial \rho_m}{\partial t} , \quad (\text{D.4})$$

dove $\rho_m \mathbf{u}$ viene comunemente definita densità di corrente. L'espressione ad una dimensione è

$$\frac{\partial(\rho_m u)}{\partial x} = - \frac{\partial \rho_m}{\partial t} . \quad (\text{D.5})$$

D.2 Equazione di Eulero

In un fluido, il tasso di cambiamento di una proprietà vettoriale $\mathbf{X}(\mathbf{r}, t)$ che dipende dalla posizione \mathbf{r} e dal tempo t viene descritto dalla derivata **convettiva**, che è una derivata totale rispetto al tempo

$$\frac{D\mathbf{X}}{Dt} = \frac{\partial\mathbf{X}}{\partial t} + \sum_{i=1}^3 \frac{\partial\mathbf{X}}{\partial x_i} \frac{\partial x_i}{\partial t} = \frac{\partial\mathbf{X}}{\partial t} + (\mathbf{u} \cdot \nabla)\mathbf{X} . \quad (\text{D.6})$$

Consideriamo un elemento infinitesimo del fluido. La forza esterna che agisce su questo elemento di fluido è data dalla derivata convettiva della velocità \mathbf{u} . Questa forza induce un gradiente della pressione esercitata dall'elemento considerato sulle altre parti del fluido. Il gradiente di pressione per unità di massa è dato dall'equazione

$$\frac{D\mathbf{u}}{Dt} = -\frac{1}{\rho_m} \nabla P , \quad (\text{D.7})$$

dove il segno - è dovuto al fatto che la forza è esterna, e una forza positiva induce un gradiente di pressione negativo. Scrivendo esplicitamente l'espressione della derivata convettiva si ha

$$-\frac{1}{\rho_m} \nabla P = \frac{\partial\mathbf{u}}{\partial t} + (\mathbf{u} \cdot \nabla)\mathbf{u} , \quad (\text{D.8})$$

e in una dimensione si ha

$$-\frac{1}{\rho_m} \frac{\partial P}{\partial x} = \frac{\partial u}{\partial t} + u \frac{\partial u}{\partial x} . \quad (\text{D.9})$$

D.3 Velocità del suono

La trattazione viene sviluppata considerando che il suono si propaga in una precisa direzione, e quindi considererò le espressioni ad una dimensione delle equazioni di Eulero e di continuità. Quest'ultima può essere scritta come

$$u \frac{\partial \rho_m}{\partial x} + \rho_m \frac{\partial u}{\partial x} = -\frac{\partial \rho_m}{\partial t} . \quad (\text{D.10})$$

Divido per ρ_m e uso la variabile $s = \delta\rho_m/\rho_m$

$$u \frac{\partial s}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial x} = -\frac{\partial s}{\partial t} . \quad (\text{D.11})$$

Considero onde sonore di piccola ampiezza. Questo significa che le variazioni della densità avvengono su distanze piccole rispetto a quelle del fluido e quindi quelle in cui il suono si propaga. I termini quadratici in u sono quindi trascurabili, e anche il termine in cui la velocità del fluido u moltiplica la variazione di densità $\delta s/\delta x$. In questa approssimazione, l'equazione precedente si trasforma in

$$\frac{\partial u}{\partial x} = -\frac{\partial s}{\partial t} \quad (\text{D.12})$$

e l'equazione di Eulero in

$$-\frac{1}{\rho_m} \frac{\partial P}{\partial x} = \frac{\partial u}{\partial t} \quad (\text{D.13})$$

Usando la definizione del modulo di compressione (2.60)

$$B = -\mathcal{V} \frac{\partial P}{\partial \mathcal{V}} = -\frac{A}{\rho_m} \frac{\partial P}{\left(-\frac{\mathcal{V}}{\rho_m} \partial \rho_m\right)} = \rho_m \frac{\partial P}{\partial \rho_m} , \quad (\text{D.14})$$

da cui $\delta P = B\delta s$, quindi posso esprimere l'equazione (D.13) come

$$\frac{\partial u}{\partial t} = -\frac{B}{\rho_m} \frac{\partial s}{\partial x} . \quad (\text{D.15})$$

Inserisco l'espressione di δu ottenuta da questa equazione nella (D.12), e ottengo l'espressione

$$\frac{B}{\rho_m} \frac{\partial^2 s}{\partial x^2} = \frac{\partial^2 s}{\partial t^2} . \quad (\text{D.16})$$

Soluzioni possibili di questa equazione sono

$$s \propto e^{i(kx - \omega t)} , \quad (\text{D.17})$$

che inserita nella (D.16) produce la relazione

$$\frac{B}{\rho_m} k^2 = \omega^2 . \quad (\text{D.18})$$

Quindi la velocità di propagazione dell'onda sonora è

$$v_s = \frac{\omega}{k} = \sqrt{\frac{B}{\rho_m}} . \quad (\text{D.19})$$

Appendice E

Equazione di Boltzmann

In questa appendice fornirò una derivazione dell'equazione di trasporto di Boltzmann. In questa derivazione il moto di una singola particella è rappresentato dalle tre componenti della posizione \mathbf{r} e dalle tre componenti della velocità \mathbf{v} . L'obiettivo è quello di determinare le variazioni delle funzione di distribuzione $f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t)$. Il numero di particelle che si trovano al tempo t nel volumetto $d\mathcal{V}$ dello spazio a sei dimensioni descritto da \mathbf{r} e \mathbf{v} è dato da $f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t)$. In altre parole, indicando con A il numero delle particelle, la probabilità di trovare una particella nel volume $d\mathcal{V}$ al tempo t è data da $(1/A)f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t)$.

La funzione di distribuzione determina completamente lo stato del sistema. Ad esempio la densità locale $\rho(\mathbf{r}, t)$ delle particelle, qualunque sia loro velocità, si ottiene semplicemente integrando sulle velocità

$$\rho(\mathbf{r}, t) = \int d^3v f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) \quad (\text{E.1})$$

Consideriamo il caso in cui non avvengono collisioni tra particelle e sul sistema agiscono delle forze esterne la cui risultante locale, al tempo t è $\mathbf{F}(\mathbf{r}, t)$. La variazione nel tempo di posizione e velocità della singola particella è data da

$$\mathbf{r}' = \mathbf{r}(t + dt) = \mathbf{r}(t) + \mathbf{v}(t)dt \quad (\text{E.2})$$

$$\mathbf{v}' = \mathbf{v}(t + dt) = \mathbf{v}(t) + \frac{\mathbf{F}(\mathbf{r}, t)}{m}dt \quad (\text{E.3})$$

La funzione di distribuzione che occupa al tempo t uno spazio $d\mathcal{V}$ evolve al tempo $t + dt$ sia perché dipende esplicitamente dal tempo, ma anche per la variazione di \mathbf{r} e \mathbf{v} . Posso scrivere la nuova funzione di distribuzione come

$$f(\mathbf{r}', \mathbf{v}', t + dt) = f(\mathbf{r}', \mathbf{v}', t + dt) + \frac{\partial f}{\partial t} + \sum_{i=1}^3 \frac{\partial f}{\partial x_i} \dot{x}_i + \sum_{i=1}^3 \frac{\partial f}{\partial v_i} \dot{v}_i \quad (\text{E.4})$$

dove il punto sopra la lettera indica la derivata parziale rispetto al tempo. Posso definire la derivata totale come

$$\frac{Df}{Dt} = \frac{\partial f}{\partial t} + \sum_{i=1}^3 \frac{\partial f}{\partial x_i} \dot{x}_i + \sum_{i=1}^3 \frac{\partial f}{\partial v_i} \dot{v}_i \quad (\text{E.5})$$

o in forma vettoriale

$$\frac{Df}{Dt} = \frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot (\nabla_{\mathbf{r}} f) + \frac{1}{m} \mathbf{F} \cdot (\nabla_{\mathbf{v}} f) \quad (\text{E.6})$$

dove i sottoindici indicano che i gradienti devono essere calcolati solo rispetto alle coordinate o alle velocità.

In una situazione in assenza di collisioni e in presenza di forze puramente conservative, cioè indipendente dalle velocità, esiste una conservazione del flusso di particelle nel volume dV . Questa affermazione può essere espressa in termini di conservazione della corrente

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \nabla(f\mathbf{v}) = 0 \quad (\text{E.7})$$

che nello spazio a 6 dimensioni $\mathbf{r} \ \mathbf{v}$ diventa

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \sum_{i=1}^3 \frac{\partial(f\dot{x}_i)}{\partial x_i} + \sum_{i=1}^3 \frac{\partial(f\dot{v}_i)}{\partial v_i} = 0 \quad (\text{E.8})$$

Quindi

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \sum_{i=1}^3 \left[\frac{\partial f}{\partial x_i} \dot{x}_i + f \frac{\partial \dot{x}_i}{\partial x_i} \right] + \left[\frac{\partial f}{\partial v_i} \dot{v}_i + f \frac{\partial \dot{v}_i}{\partial v_i} \right] = 0 \quad (\text{E.9})$$

e

$$\frac{Df}{Dt} + f \sum_{i=1}^3 \left(\frac{\partial \dot{x}_i}{\partial x_i} + \frac{\partial \dot{v}_i}{\partial v_i} \right) = 0 \quad (\text{E.10})$$

Dato che l'hamiltoniana è conservativa valgono le equazioni di Hamilton

$$\dot{x}_i = \frac{\partial H}{\partial p_i} = \frac{\partial H}{m \partial v_i} \quad (\text{E.11})$$

$$-\dot{p}_i = -m\dot{v}_i = \frac{\partial H}{\partial x_i} \quad (\text{E.12})$$

$$\frac{\partial \dot{x}}{\partial p_i} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left[\frac{\partial H}{m \partial v_i} \right] = \frac{1}{m} \left[\frac{\partial^2 H}{\partial v_i \partial x_i} \right] = \frac{\partial}{\partial v_i} \left[\frac{1}{m} \frac{\partial H}{\partial x_i} \right] = -\frac{\partial \dot{v}_i}{\partial v_i} \quad (\text{E.13})$$

Quindi

$$\frac{Df}{Dt} = 0 \quad (\text{E.14})$$

Le collisioni tra le varie particelle modificano la (E.14) in

$$\frac{Df}{Dt} = \Delta^+ - \Delta^- \quad (\text{E.15})$$

dove Δ^- indica il decremento di f dovuto alle particelle che, per effetto delle collisioni con altre particelle nel volume fisico $dV = d\mathbf{r}$, si trovano ad avere una velocità finale diversa da \mathbf{v} , Δ^+ , viceversa, indica il decremento positivo dovuto alle particelle che, in dV , hanno in origine un valore diverso di \mathbf{v} , e poi, per collisioni, alla fine hanno velocità tra \mathbf{v} e $\mathbf{v} + d\mathbf{v}$. Tutto questo avviene nell'unità di tempo.

Per valutare questi due termini faremo una serie di ipotesi.

1. Il libero cammino medio sia molto maggiore delle dimensioni delle particelle.
2. Interazioni a corto raggio.
3. Collisioni binarie. Collisioni a tre, o più, particelle sono trascurabili.
4. Collisioni elastiche.

Considero prima Δ^- . Considero una particella con velocità \mathbf{v} che collide con una di velocità iniziale \mathbf{w} . Indico con \mathbf{v}' e \mathbf{w}' le velocità dopo la collisione. Poiché considero solo la collisione elastica ottengo per conservazione dell'impulso e dell'energia rispettivamente

$$\mathbf{v} + \mathbf{w} = \mathbf{v}' + \mathbf{w}' \quad (\text{E.16})$$

$$v^2 + w^2 = (v')^2 + (w')^2 \quad (\text{E.17})$$

I moduli delle velocità relative $\mathbf{V} = \mathbf{v} - \mathbf{w}$ e $\mathbf{V}' = \mathbf{v}' - \mathbf{w}'$ rimangono invariati

$$|\mathbf{V}| = |\mathbf{V}'| \quad (\text{E.18})$$

Indico con $\sigma_{\mathbf{v}, \mathbf{w} \rightarrow \mathbf{v}', \mathbf{w}'}$ la sezione d'urto elastica di questa collisione. La sezione d'urto è invariante per inversione temporale, $t \rightarrow -t$, quindi

$$\sigma_{\mathbf{v}, \mathbf{w} \rightarrow \mathbf{v}', \mathbf{w}'} = \sigma_{\mathbf{v}', \mathbf{w}' \rightarrow \mathbf{v}, \mathbf{w}} \quad (\text{E.19})$$

questo significa che, una volta fissato il valore della velocità relativa $|\mathbf{V}|$ la sezione d'urto dipende solo dalle direzioni incidente ed entranti, in altre parole dall'angolo solido Ω in cui le particelle vengono diffuse. Nel caso specifico di collisioni di particelle non polarizzate, a maggior ragione quelle prive di spin, dipende solo dall'angolo θ tra direzione incidente e diffusa. Quindi abbiamo che

$$\int d^3v' d^3w' \sigma_{\mathbf{v}, \mathbf{w} \rightarrow \mathbf{v}', \mathbf{w}'} = \int d\Omega \sigma(\Omega) \quad (\text{E.20})$$

Il numero di molecole che, per effetto delle collisioni, nell'unità di tempo, passano da (\mathbf{v}, \mathbf{w}) a $(\mathbf{v}', \mathbf{w}')$ oltre che dalla sezione d'urto deve essere proporzionale al flusso, quindi alla velocità relativa $\mathbf{v} - \mathbf{w}$, e alla probabilità, congiunta, di trovare una particella con velocità \mathbf{v} e una con velocità \mathbf{w} . A questo punto si introduce una nuova ipotesi: la probabilità congiunta è data dal prodotto delle due probabilità. Questo significa trascurare le correlazioni e considerare indipendenti le due particelle interagenti. Questa probabilità è quindi il prodotto di $f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t)$ per $f(\mathbf{r}, \mathbf{w}, t)$ che scriverò come $f_{\mathbf{v}} f_{\mathbf{w}}$. Mettendo assieme tutte le ipotesi ottengo

$$\Delta^- = \int d^3w d^3v' d^3w' |\mathbf{v} - \mathbf{w}| \sigma_{\mathbf{v}, \mathbf{w} \rightarrow \mathbf{v}', \mathbf{w}'} f_{\mathbf{v}} f_{\mathbf{w}} \quad (\text{E.21})$$

Il ragionamento per il calcolo di Δ^+ è analogo. Bisogna sostituire \mathbf{v} e \mathbf{w} con \mathbf{v}' e \mathbf{w}' rispettivamente.

$$\Delta^+ = \int d^3w d^3v' d^3w' |\mathbf{v}' - \mathbf{w}'| \sigma_{\mathbf{v}', \mathbf{w}' \rightarrow \mathbf{v}, \mathbf{w}} f_{\mathbf{v}'} f_{\mathbf{w}'} \quad (\text{E.22})$$

Considerando l'invarianza del modulo delle velocità relative (E.18) l'invarianza per inversione temporale (E.19), la relazione (E.20) tra le sezioni d'urto, l'equazione di trasporto (E.15) diventa

$$\begin{aligned} \frac{Df}{Dt} &= \int d^3w d^3v' d^3w' |\mathbf{v} - \mathbf{w}| \sigma_{\mathbf{v}, \mathbf{w} \rightarrow \mathbf{v}', \mathbf{w}'} (f_{\mathbf{v}'} f_{\mathbf{w}'} - f_{\mathbf{v}} f_{\mathbf{w}}) \\ &= \int d^3w d\Omega |\mathbf{v} - \mathbf{w}| \sigma(\Omega) (f_{\mathbf{v}'} f_{\mathbf{w}'} - f_{\mathbf{v}} f_{\mathbf{w}}) \end{aligned} \quad (\text{E.23})$$

nell'espressione più estesa

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot (\nabla_{\mathbf{r}} f) + \frac{1}{m} \mathbf{F} \cdot \nabla_{\mathbf{v}} f = \int d^3w d\Omega |\mathbf{v} - \mathbf{w}| \sigma(\Omega) (f_{\mathbf{v}'} f_{\mathbf{w}'} - f_{\mathbf{v}} f_{\mathbf{w}}) \quad (\text{E.24})$$

La parte destra di questa equazione, detta di trasporto di Boltzmann, viene chiamata integrale di collisione, $\mathcal{I}(f)$.

Appendice F

Sigle

CBF	Correlated Basis Function
FG	Fermi Gas
FHNC	Fermi Hypernetted Chain
GFMC	Green Function Monte Carlo
HF	Hartree-Fock
HNC	Hypernetted Chain
OBDM	One body density matrix
QED	Quantum Electrodynamics
QCD	Quantum Chromodynamics
RNO	Rappresentazione dei numeri di occupazione.
RPA	Random Phase Approximation
TBDF	Two-body density function
VMC	Variational Monte Carlo

Appendice G

Simboli

a, a^+	Operatori di creazione e distruzione
A	Numero di particelle
E	Energia del sistema interagente
\mathcal{E}	Energia del sistema non interagente
G	Funzione di Green
\mathcal{G}	Interazione effettiva da teoria di Brueckner
h	Hamiltoniana di singola particella
H	Hamiltoniana totale
H_0	Hamiltoniana ad un corpo, di campo medio
H_1	Termine perturbativo, di interazione, dell'hamiltoniana H
T	Operatore di energia cinetica dell'hamiltoniana
V	Potenziale di interazione
Y_{lm}	Armonica sferica
\mathcal{Y}_{ljm}	Armonica sferica di spin
\mathcal{V}	Volume del sistema
$\delta(x)$	Distribuzione, funzione, di Dirac
$\delta_{i,j}$	Simbolo di Kronecker
Φ	Determinante di Slater, autostato di H_0
ϕ_i	Funzione d'onda di singola particella
Ψ	Autostato dell'hamiltoniana a multicorpi H
ψ, ψ^+	operatori di campo
ρ_ϵ	Densità degli stati
Σ	Autoenergia
$\Theta(x)$	Funzione di Heaviside, a gradino
Ω	Coordinate angolari polari sferiche

Bibliografia

- [Abe66] W. R. Abel, A. C. Anderson, J. C. Wheatley, Phys. Rev. Lett. 17 (1996) 74.
- [Abr75] A. A. Abrikosov, L. P. Gorkov, I. E. Dzyaloshinski, Methods of quantum field theory in statistical physics, Dover, New York (1975).
- [Akm98] A. Akmal, V. R. Pandharipande, D. G. Ravenhall, Phys. Rev. C 58 (1998) 1804.
- [Ash76] N. W. Ashcroft and N. D. Mermin, Solid State Physics, Saunders, Orlando, (1976).
- [Blu06] S. J. Blundell, K. M. Blundell, Concepts in Thermal Physics, Oxford University Press, Oxford (2006).
- [Bru04] H. Bruus, K. Flensbeg, Many-body Quantum Theory in Condensed Matter Physics, Oxford Univ. Press, Oxford (2004).
- [Car05] J. Carlson, S. Gandolfi, F. Pederiva, S. C. Pieper, R. Schiavilla, K.E. Schmidt, R.B. Wiringa Rev. Mod. Phys. 87 (2015).
- [Co12] G. Co', V. De Donno, P. Finelli, M. Grasso, M. Anguiano, A. M. Lallena, C. Giusti, A. Meucci, F. D. Pacati, Phys. Rev. C 85 (2012) 024322.
- [Coe77] C. Cohen-Tannoudji, B. Diu, F. Laloë, Quantum Mechanics, John Wiley, New York (1977).
- [Fan74] S. Fantoni, S. Rosati, Nuov. Cim. A 20 (1974) 179.
- [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).
- [Gan10] S. Gandolfi, A. Y. Illarionov, S. Fantoni, J. C. Miller, F. Pederiva, K. E. Schmidt, Mont. Not. R. Astron. Soc. 404 (2010) L35.
- [Gro91] E. K. U. Gross, E. Runge and O. Heinonen, Many-particle theory, Adam Hilger, Bristol (1991).
- [Goo85] D. L. Goodstein, States of matter, Dover, New York (1985).
- [Kit86] C. Kittel, Introduction to Solid State Physics, John Wiley, New York (1986).
- [Kra88] K. Krane, Introductory Nuclear Physics, John Wiley & sons, New York (1988).
- [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).

- [May40] J. E. Mayer, M. G. Mayer, Statistical Mechanics, Wiley, New York (1940).
- [Mes61] A. Messiah, Quantum Mechanics, North Holland, Amsterdam (1961), anche, Dover, New York (2014).
- [Sch92] K. E. Schmidt, D. E. Ceperley, Monte Carlo Techniques for Quantum Fluids, Solids and Droplets, in The Monte Carlo Method in Condensed Matter Physics, ed. K. Binder, Topics in Applied Physics, Vol 71, Springer-Verlag, (1992).