
Il principio variazionale nella fisica dei sistemi quantistici a molticorpi

Giampaolo Co'

Dipartimento di Matematica & Fisica "Ennio De Giorgi" - Università del Salento

Il problema quantistico a molticorpi è affrontato ricercando soluzioni approssimate dell'equazione di Schrödinger. In questo ambito, il principio variazionale è uno dei metodi più usati. La sua applicazione più conosciuta, e semplice, è quella ad un sistema di particelle non interagenti. Questo conduce alla formulazione delle equazioni di Hartree-Fock. Il principio variazionale è utilizzato anche per descrivere sistemi di particelle in interazione tra loro. Le teorie che sono state sviluppate in questo ambito sono più elaborate e difficili da gestire, ma hanno assunto una grande rilevanza per la descrizione di liquidi quantistici.

Introduzione

Per descrivere un sistema composto è innanzitutto necessario scegliere le componenti fondamentali sulle quali basare la descrizione. In questa modellizzazione si trascurano le dimensioni e soprattutto la struttura interna di tali componenti. Ad esempio, la descrizione di un nucleo atomico, si basa normalmente sui nucleoni, nome

generico per indicare protoni e neutroni, considerandoli puntiformi, nonostante siano sistemi estesi composti da quark e gluoni. Analogamente, nella descrizione di un liquido quantistico si trascura la struttura interna delle molecole che lo compongono.

Una volta scelte le componenti fondamentali, che d'ora in poi chiamerò particelle, è richiesta la conoscenza della loro interazione reciproca. Normalmente questa interazione viene ottenuta dallo studio dei sistemi di due particelle, sistemi nucleone-nucleone per il caso nucleare e bi-molecolari per quello del liquido quantistico.

A questo punto il problema a molticorpi è ben definito. Nel caso in cui le energie cinetiche delle singole particelle siano molto inferiori al valore delle loro masse a riposo, il problema può essere trattato in termini di meccanica quantistica non relativistica, quindi si riduce alla ricerca di soluzioni dell'equazione di Schrödinger a molti corpi,

$$H(1, \dots, N)\Psi(1, \dots, N) = E\Psi(1, \dots, N) . \quad (1)$$

Nell'equazione precedente, ho indicato con N il numero di particelle che compongono il sistema,

Il principio variazionale: parte prima

Il principio variazionale afferma che la ricerca del minimo del funzionale dell'energia (3) è equivalente alla soluzione dell'equazione di Schrödinger (1). Possiamo riscrivere l'Eq. (3) moltiplicando entrambi i membri per il denominatore e quindi applicare la variazione

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

Imporre $\delta E(\Psi) = 0$ equivale quindi a richiedere che

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

I due termini dell'equazione precedente sono, di fatto, indipendenti uno dall'altro perché si possono far variare indipendentemente le parti reali ed immaginarie di Ψ . Questo implica che dobbiamo imporre separatamente

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

Dato che è sempre possibile trovare una variazione di $|\Psi\rangle$ diversa da zero, ognuna di queste equazioni corrisponde separatamente all'equazione di Schrödinger (1).

e con H l'operatore hamiltoniano

$$H = \sum_{i=1}^N -\frac{\hbar^2}{2m_i} \nabla_i^2 + \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^N v(i,j) \quad (2)$$

dove il primo termine rappresenta l'energia cinetica del sistema. Nell'equazione (1) Ψ è la funzione d'onda che descrive lo stato delle N particelle, e l'autovalore E rappresenta l'energia totale, non relativistica, del sistema. Gli argomenti di H e Ψ rappresentano le variabili che identificano ogni particella: posizione, spin ed, eventualmente, altro.

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

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

Anche se ben definito, il problema è di difficile soluzione. Un modo semplice per comprendere le difficoltà nel risolvere l'equazione (1) consiste nel moltiplicare l'equazione, a sinistra, per Ψ^* e poi integrare e sommare su tutte le variabili che identificano le particelle. In questo modo otteniamo un'espressione per l'energia

$$E = \frac{\int d1 \cdots dN \Psi^* H \Psi}{\int d1 \cdots dN \Psi^* \Psi} = \frac{\langle \Psi | H | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle} , \quad (3)$$

dove nell'ultimo termine ho utilizzato la notazione di Dirac. Il simbolo di integrazione nell'equazione precedente non indica solo l'integrazione sulle coordinate spaziali, ma anche la somma sulle coordinate discrete che definiscono le particelle. Ad esempio per i nucleoni sono spin, ed isospin. Per ottenere il valore dell'energia bisogna effettuare il calcolo di tanti integrali spaziali a $3N$ dimensioni quante sono le diverse possibili configurazioni permesse dalle variabili discrete. Nel caso di un nucleo composto da Z protoni e $N - Z$ neutroni, questo numero è

$$\mathcal{N}_{\text{conf}} = 2^N \frac{N!}{Z!(N-Z)!} . \quad (4)$$

Per esempio, per il nucleo di ^3He questo significa considerare che il primo nucleone è un protone con spin allineato all'insù, il secondo un neutrone con spin

Il principio variazionale: parte seconda

Esprimiamo uno stato di prova $|\Phi\rangle$ come combinazione lineare degli autostati $|\Psi_n\rangle$ dell'hamiltoniana H

$$|\Phi\rangle = \sum_n A_n |\Psi_n\rangle,$$

dove abbiamo indicato con A_n dei numeri complessi e

$$H|\Psi_n\rangle = E_n |\Psi_n\rangle.$$

Il funzionale dell'energia dipendente dalle funzioni di prova $|\Phi\rangle$ può essere scritto come

$$E[\Phi] = \frac{\langle \Phi | H | \Phi \rangle}{\langle \Phi | \Phi \rangle} = \frac{\sum_{nn'} \langle \Psi_{n'} | A_{n'}^* H A_n | \Psi_n \rangle}{\sum_{nn'} \langle \Psi_{n'} | A_{n'}^* A_n | \Psi_n \rangle} = \frac{\sum_{nn'} A_{n'}^* A_n \langle \Psi_{n'} | H | \Psi_n \rangle}{\sum_n |A_n|^2},$$

dove, nell'ultimo passaggio, ho utilizzato l'ortonormalità delle funzioni d'onda $|\Psi_n\rangle$. Considerando l'equazione di Schrödinger posso riscrivere l'ultima equazione in funzione degli autovalori dell'energia E_n .

$$E[\Phi] = \frac{\sum_n |A_n|^2 E_n}{\sum_n |A_n|^2} \geq \frac{\sum_n |A_n|^2 E_0}{\sum_n |A_n|^2} = E_0,$$

qui ho considerato che, in generale, i valori di $E_{n>0}$ sono maggiori del valore di E_0 , l'energia nello stato fondamentale. Il segno di uguale è valido solo, nel caso molto raro, in cui tutti gli autovalori dell'energia siano degeneri.

Il risultato ottenuto indica che la ricerca del minimo del funzionale E in uno spazio limitato a funzioni di prova permette di ottenere, al massimo, un limite superiore al vero valore dell'energia ovvero all'autovalore dell'hamiltoniano H .

allineato all'ingiù e il terzo un neutrone con spin all'insù, e quindi fare l'integrale a 9-dimensioni. Poi cominciare a scambiare terza proiezione di spin e e nucleoni per formare le possibili 24 configurazioni ed effettuare gli integrali a 9 dimensioni per ognuna delle configurazioni.

Nella Tabella 1 presento i valori del numero di configurazioni di spin e isospin per alcuni nuclei. Per un nucleo medio-pesante come il ^{40}Ca , il numero di configurazioni è confrontabile con il numero di Avogadro. Anche supponendo di poter eseguire l'integrale a 120 dimensioni in un millisecondo, il tempo di calcolo richiesto è circa dieci volte quella che si stima sia l'attuale età dell'universo.

La tecnica oggi utilizzata per risolvere l'equazione (3) senza fare alcuna approssimazione è detta Green's function Montecarlo [1]. Partendo da una funzione d'onda di prova $|\Psi_T(t)\rangle$ definita ad un certo tempo t , questa tecnica fa evolvere nel tempo il valore di E e nel limite di tempi molto grandi, infiniti teoricamente ma

non numericamente, nella funzione d'onda $|\Psi_T(t)\rangle$ rimane solo l'autostato di H con il valore più basso dell'energia, lo stato fondamentale.

Al momento, l'applicazione di questi metodi è stata possibile soltanto per studiare nuclei fino al ^{12}C [2]. Si tratta di un grande successo dal punto di vista tecnico, e anche teorico, perché ha verificato la validità delle ipotesi che soggiacciono alla scelta di risolvere l'equazione di Schrödinger (1). È comunque evidente che questa metodologia non può essere utilizzata per svolgere uno studio sistematico della maggior parte dei nuclei, ed in generale di sistemi con numero di particelle superiore a poche decine.

Scopo delle teorie a multicorpi è quello di cercare delle soluzioni approssimate dell'equazione di Schrödinger (1). Le soluzioni sono tanto più valide quanto meglio sono controllate le approssimazioni.

Nella ricerca di soluzioni approssimate dell'equazione (1) il principio variazionale svolge un

ruolo molto importante. L'idea fondamentale è quella di considerare l'eq. (3) come la definizione del funzionale dell'energia che dipende dalle funzioni d'onda Ψ . La soluzione del problema consiste così nel trovare il minimo del funzionale.

Nei due riquadri presento in maniera un po' più formale le due proprietà, a mio avviso, più rilevanti del principio variazionale. La prima indica che la ricerca del minimo del funzionale (3) equivale a risolvere l'equazione di Schrödinger (1). Questa proprietà è valida solo se, nella ricerca del minimo, non si pone alcuna restrizione all'espressione che la funzione d'onda Ψ deve assumere. In realtà il principio variazionale viene utilizzato proprio ipotizzando che Ψ abbia specifiche caratteristiche, quindi limitando la ricerca del minimo in un sottoinsieme, o meglio sottospazio, dell'insieme totale di tutte le possibili soluzioni del problema variazionale. A questo punto si inserisce la seconda proprietà del principio variazionale, illustrata nel secondo riquadro. L'energia ottenuta minimizzando il funzionale dell'energia in un sottospazio dello spazio delle funzioni d'onda Ψ fornisce un limite superiore al vero valore dell'energia dello stato fondamentale.

Le due proprietà che ho illustrato forniscono delle regole pragmatiche che chi fa calcoli variazionali ha sempre ben in mente. Di solito, ampliando il sottospazio delle Ψ nel quale si ricerca il minimo si ottiene un valore inferiore dell'energia. Può succedere che si ottenga anche un valore uguale, ma mai superiore. Dall'altro lato, un calcolo variazionale che ottiene un valore inferiore dell'energia, è migliore, nel senso che si avvicina di più al valore vero. Normalmente, risultati che non rispettano queste semplici regole empiriche hanno problemi, nel calcolo oppure nella definizione stessa del problema variazionale.

Nella sezione seguente presenterò l'applicazione del principio variazionale più conosciuta, ed utilizzata, quella ad un sistema di particelle non interagenti. Nella sezione successiva presenterò alcune applicazioni del principio variazionale al caso di sistemi di particelle interagenti.

Particelle indipendenti

I sistemi fisici a multicorpi presentano alcune caratteristiche determinate quasi esclusiva-

mente dalle proprietà delle particelle che li compongono, come se queste non interagissero tra loro. Queste evidenze empiriche hanno spinto alla formulazione di modelli a particelle indipendenti.

In questi modelli il sistema è descritto come insieme di particelle che si muovono indipendentemente una dall'altra. Nei modelli più elaborati le particelle sono soggette alla presenza di un campo di forza con il quale interagiscono individualmente e che serve a tenere legato il sistema. Il principio variazionale dà fondamento teorico a questi modelli.

Descrivere il sistema a multicorpi in termini di particelle indipendenti significa considerare che le caratteristiche del sistema sono ottenute come somma delle proprietà di ogni particella. In altre parole, l'operatore hamiltoniano H che descrive il sistema è espresso come somma di operatori hamiltoniani di ogni singola particella. Questo modello implica la trasformazione

$$H \longrightarrow H_{\text{MF}} = \sum_i h(i) , \quad (5)$$

dove la somma è estesa a tutte le particelle, e questa è la convenzione che userò da questo momento in poi, e il pedice MF significa *mean-field*. Una possibile soluzione dell'equazione di Schrödinger con l'hamiltoniano H_{MF} è data dal prodotto degli autostati degli hamiltoniani h di singola particella

$$h(i)\phi_{\nu_i}(i) = \epsilon_i\phi_{\nu_i}(i) , \quad (6)$$

dove ν indica tutti i numeri quantici che caratterizzano lo stato di singola particella.

Nel caso in cui le particelle siano fermioni, cioè abbiano spin semi-intero, come elettroni o nucleoni, la funzione d'onda totale deve essere totalmente antisimmetrica per lo scambio di due particelle. Questo significa che la soluzione fisicamente accettabile del problema è data dalla combinazione lineare di prodotti antisimmetrizzati di funzioni d'onda di singola particella. Matematicamente queste funzioni d'onda a multicorpi possono essere espresse come determinanti di prodotti di funzioni d'onda. Questi determinanti sono noti in letteratura come determinanti di

Slater [3]

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

Il fattore $1/\sqrt{N!}$ è inserito per normalizzare Φ ad 1.

Il principio variazionale viene applicato cercando il minimo del funzionale dell'energia nel sottospazio formato dagli stati che sono singoli determinanti di Slater

$$\begin{aligned} & \delta \left(\frac{\langle \Phi | H | \Phi \rangle}{\langle \Phi | \Phi \rangle} - \sum_{i,j} \lambda_{ij} \langle \phi_{\nu_i} | \phi_{\nu_j} \rangle \right) \\ &= \delta \left(\frac{\langle \Phi | H_{MF} | \Phi \rangle}{\langle \Phi | \Phi \rangle} - \sum_{i,j} \lambda_{ij} \langle \phi_{\nu_i} | \phi_{\nu_j} \rangle \right) \\ &= 0. \end{aligned} \quad (7)$$

Il secondo termine nelle parentesi rappresenta la condizione che le funzioni d'onda di singola particella ϕ_{ν_i} devono essere ortonormali. Nell'equazione (7) ho indicato con λ_{ij} i moltiplicatori di Lagrange.

Inserendo nella (7) esplicitamente l'espressione del determinante di Slater ed effettuando la variazione sulle funzioni ϕ_{ν_i} , è possibile ricavare un sistema di equazioni integro-differenziali non-lineari le cui incognite sono le ϕ_{ν_i} e λ_{ij}

$$\begin{aligned} & -\frac{\hbar^2}{2m_i} \nabla^2 \phi_{\nu_i}(\mathbf{r}) + V(\mathbf{r}) \phi_{\nu_i}(\mathbf{r}) \\ & - \int d^3 r' W(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \phi_{\nu_i}(\mathbf{r}') = \lambda_{ij} \delta_{ij} \phi_{\nu_j}(\mathbf{r}), \end{aligned} \quad (8)$$

dove δ_{ij} è il simbolo di Krönecker. Nell'equazione precedente il potenziale locale V , detto di Hartree [4], è definito come

$$V(\mathbf{r}) = \int d^3 r' \sum_{\nu_i} v(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \phi_{\nu_i}^*(\mathbf{r}') \phi_{\nu_i}(\mathbf{r}'), \quad (9)$$

e il potenziale non locale W , detto di Fock-Dirac [5], ha l'espressione

$$W(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \sum_{\nu_i} v(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \phi_{\nu_i}^*(\mathbf{r}) \phi_{\nu_i}(\mathbf{r}'). \quad (10)$$

Si può dimostrare che gli autovalori $\epsilon_i \equiv \lambda_{ij} \delta_{ij}$ corrispondono all'energia necessaria per

estrarre la particella i dal sistema [6]. Questa è la definizione empirica dell'energia di singola particella.

Le equazioni Hartree-Fock sono normalmente risolte numericamente con un metodo iterativo. Utilizzando un insieme di funzioni d'onda di prova $\phi_{\nu_i}^T$ si calcolano i potenziali V e W e si inseriscono nella (8) che viene risolta con tecniche numeriche standard fornendo i valori di λ e ϕ per ogni singola particella. Con questo nuovo insieme di stati di singola particella si ripete il processo fino a quando i risultati non convergono. Normalmente la convergenza viene cercata sui valori di λ .

Il metodo Hartree-Fock è quasi esclusivamente utilizzato per la descrizione dello stato fondamentale di sistemi finiti, ovvero sistemi le cui dimensioni globali sono confrontabili con le distanze tra due particelle, quindi sistemi come nuclei, atomi, molecole, cluster molecolari ecc.

Il confronto tra i risultati ottenuti con il metodo Hartree-Fock con numerosi dati sperimentali è così soddisfacente da far spesso ritenere che il modello a campo medio sia la soluzione del problema a multicorpi. Metto ancora una volta in risalto che la scelta di applicare il principio variazionale a funzioni d'onda a multicorpi che possono essere espresse come singoli determinanti di Slater genera funzioni d'onda che non sono autostati dell'hamiltoniano H , ma solo di quella parte che può essere espressa come somma di operatori ad un corpo come indica la trasformazione (5). Il modello a particelle indipendenti trasforma, semplificandolo, il problema a molti corpi in molti problemi ad un corpo.

Particelle interagenti

La parte dell'operatore hamiltoniano trascurata nel modello a particelle indipendenti fa interagire le particelle tra loro ed è la sorgente di tutti i fenomeni collettivi che il sistema presenta. L'applicazione del principio variazionale a sistemi di particelle interagenti implica una ricerca del minimo del funzionale dell'energia in un sottospazio più ampio di quello definito da singoli determinanti di Slater.

Un'espressione di funzioni d'onda di prova

molto utilizzata è [7]:

$$\Psi_T(1, \dots, N) = F(1, \dots, N) \Phi(1, \dots, N), \quad (11)$$

dove Φ è un determinante di Slater e F è detta funzione di correlazione a N corpi ed è definita come prodotto di correlazioni a due corpi $f(ij)$

$$F(1, \dots, N) = \prod_{i < j} f(ij). \quad (12)$$

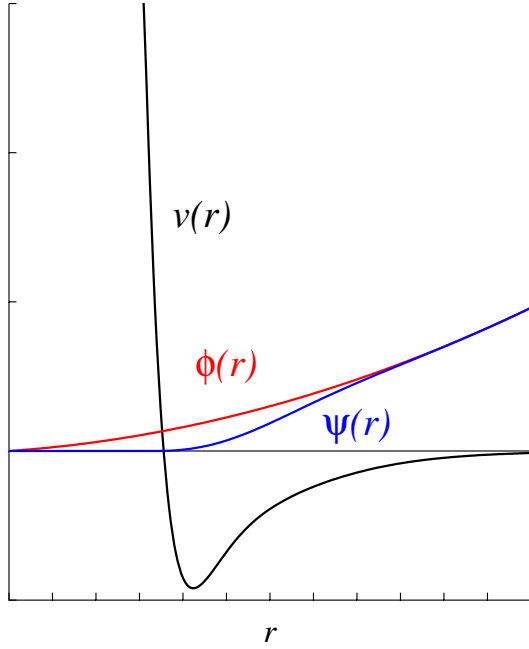


Figura 1: La funzione ϕ indica la funzione d'onda relativa tra due particelle non interagenti, la funzione ψ quella tra due particelle che interagiscono con il potenziale v .

La motivazione fisica alla base di questa scelta della funzione d'onda di prova è legata alla forma del potenziale di interazione tra due particelle, che può essere schematizzata come indicato nella figura 1. A grandi distanze il potenziale è nullo, a distanze intermedie è attrattivo e, a piccole distanze, presenta un core fortemente repulsivo. Questa forma del potenziale è comune a tutti i casi in cui le particelle che interagiscono hanno una struttura interna, indipendentemente dall'origine microscopica dell'interazione tra i componenti della particella. La forma del potenziale tra due nucleoni, le cui distanze sono dell'ordine di 10^{-15} m, è analoga a quella del potenziale tra due atomi o tra due molecole che interagiscono a distanze centomila volte più grandi. Nonostante

la variazione della scala delle distanze, i problemi del sistema a multicorpi da affrontare sono analoghi nel nucleo, nelle molecole, nei liquidi, e nei solidi.

Un modo per rendere evidenti questi problemi consiste nel far tendere all'infinito il valore del potenziale nella regione del core repulsivo. Alcune parametrizzazioni dell'interazione tra due nucleoni datate primi anni '70 del secolo scorso hanno questa caratteristica.

Affinché l'equazione di Schrödinger abbia significato fisico in tutto lo spazio, il prodotto tra operatore hamiltoniano, che contiene il potenziale v , e la sua autofunzione ψ deve sempre essere finito. Questo implica che se il potenziale tende all'infinito la funzione d'onda deve tendere a zero.

Le soluzioni dell'equazione di Schrödinger cercate utilizzando il principio variazionale con funzioni d'onda da modello a particelle indipendenti non sono nulle nella regione dove il potenziale tende all'infinito. La funzione di correlazione è costruita in modo che

$$\lim_{r_{ij} \rightarrow 0} f(r_{ij}) \phi_{\nu_i}(\mathbf{r}_i) \phi_{\nu_j}(\mathbf{r}_j) = 0, \quad (13)$$

dove r_{ij} è la distanza tra le due particelle. Questo significa che tutte le funzioni d'onda di prova (11) hanno il corretto comportamento a piccole distanze.

Il funzionale dell'energia ottenuto utilizzando la funzione di prova (11) è

$$E[\Psi_T] = \frac{\langle \Phi | F^+ H F | \Phi \rangle}{\langle \Phi | F^+ F | \Phi \rangle}. \quad (14)$$

Confrontando questa espressione con quella del funzionale di campo medio (7) possiamo identificare

$$H_{MF} = F^+ H F. \quad (15)$$

Questo aspetto mette in evidenza un fatto troppo spesso trascurato nelle presentazioni del metodo Hartree-Fock. L'interazione da utilizzare nella teoria Hartree-Fock non è quella che si ottiene dall'analisi dei sistemi a due particelle. Inserendo un potenziale che tende all'infinito nelle equazioni Hartree-Fock (8) ci si rende immediatamente conto che non si producono soluzioni finite. Il potenziale effettivo da usare in Hartree-Fock

non deve avere core fortemente repulsivo nella zona delle piccole distanze di interazione.

Questo aspetto è ben noto in fisica nucleare dove la differenza tra interazione nuda, quella estratta dai sistemi a due particelle, ed effettiva, quella da usare in calcoli Hartree-Fock, è notevole. La differenza tra queste due interazioni è legata alla rilevanza degli effetti prodotti dalla funzione di correlazione F . La funzione di correlazione modifica la struttura della funzione d'onda a piccole distanze relative tra le particelle. Quanto più grande è il numero di particelle nel volume caratterizzato dal core repulsivo, quantità detta densità relativa nel gergo della fisica a multicorpi, tanto più importanti sono gli effetti della funzione di correlazione.

La densità relativa di materia nucleare è 0.08 particelle, mentre quella dell'elio liquido di 2.4 particelle. L'elio liquido è relativamente più denso della materia nucleare. In atomi e molecole, le densità relative delle nubi elettroniche sono così basse che l'uso in calcoli Hartree-Fock del potenziale coulombiano nudo, anche se formalmente incorretto, è, pragmaticamente, accettabile.

Nel caso delle particelle indipendenti, trattato nella sezione precedente, la variazione avviene sulla forma delle funzioni d'onda ϕ_{ν_i} di singola particella. Nel caso della funzione di prova (11) la variazione viene effettuata anche sull'espressione delle funzioni di correlazione f .

Come si può facilmente immaginare la ricerca del minimo del funzionale (14) è molto più complessa che nel caso della teoria Hartree-Fock. In questo caso non è possibile ottenere un sistema chiuso di equazioni che risolve il problema senza alcuna approssimazione. Un metodo è quello di risolvere il problema del calcolo dell'integrale multidimensionale dell'equazione (14) utilizzando tecniche di integrazione numerica Monte Carlo. In questo caso non ci sono approssimazioni, ma ci si scontra con le difficoltà illustrate nell'introduzione, dovute al grande numero di configurazioni di spin-isospin da considerare.

Il problema della soluzione approssimata dell'equazione (14) è stato affrontato in prima battuta per sistemi infiniti, ovvero quei sistemi a multicorpi che hanno dimensioni totali molto maggiori delle distanze medie tra le particelle interagenti. Questi sistemi hanno invarianza traslazionale e le funzioni d'onda di singola particella

sono autostati dell'impulso $\mathbf{p}_i = \hbar \mathbf{k}_i$, quindi la loro espressione funzionale è quella dell'onda piana

$$\phi_{\nu_i}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}_i \cdot \mathbf{r}}. \quad (16)$$

In questi sistemi la variazione avviene solo sulla funzione di correlazione e questo semplifica il problema. La soluzione del problema variazionale è stata affrontata sviluppando tecniche che analizzano il funzionale di energia come somma del contributo di gruppi di particelle legate dalla funzione di correlazione a due corpi f . Un'analisi topologica di questi cluster permette di scrivere un sistema chiuso di equazioni integrali che somma tutti i diagrammi di una particolare categoria.

La teoria, formulata inizialmente per sistemi bosonici, prende il nome di Hypernetted Chain (HNC), catene iperconnesse, ed è stata applicata con successo ai liquidi quantistici come l'elio e anche l'acqua [8]. La sua estensione a sistemi fermionici, Fermi Hypernetted Chain (FHNC) [9], è più recente ed ha permesso la sua applicazione allo studio della materia nucleare infinita e della materia di neutroni la cui equazione di stato è necessaria per la comprensione della stabilità delle stelle di neutroni. In anni più recenti la teoria FHNC è stata estesa per essere applicata a sistemi nucleari finiti, nello specifico a nuclei doppio magici [10].

Teorie come HNC e FHNC permettono di utilizzare le interazioni microscopiche tra due particelle perché sono costruite per gestire il problema del core repulsivo. Il confronto tra queste teorie microscopiche e quelle effettive permette di comprendere il ruolo delle correlazioni, ovvero di tutti quei fenomeni che non possono essere descritti dal modello a particelle indipendenti.

Conclusioni

Il problema quantistico a multicorpi è ben definito: si tratta di risolvere l'equazione di Schrödinger che descrive il sistema. Dal punto di vista pragmatico, quando il numero di particelle del sistema supera le poche decine, il problema non è più risolvibile senza fare approssimazioni. Si cercano, quindi, soluzioni approssimate che siano il più possibile affidabili.

Rispetto ad altre metodologie, i vantaggi del principio variazionale sono legati alla sua semplicità concettuale, che, con poche e ben definite ipotesi permette di definire il problema senza ambiguità. Le difficoltà sono di carattere tecnico e computazionale, ma gli elementi con cui si lavora, funzioni d'onda e di correlazione, sono ben definiti nell'ambito del formalismo e hanno un significato fisico ben preciso.

L'applicazione del principio variazionale nell'ipotesi che le particelle del sistema non interagiscano tra loro conduce alle equazioni Hartree-Fock. La teoria Hartree-Fock è il fondamento teorico sul quale si basano tutti i modelli a campo medio, ampiamente utilizzati, con successo, per la descrizione di molti osservabili.

D'altra parte, i modelli a campo medio non riescono, per definizione, a descrivere fenomeni collettivi del sistema, e devono essere estesi per considerare l'interazione tra le particelle. Le tecniche più note, ed utilizzate, per descrivere sistemi di particelle interagenti sono ispirate alla teoria dei campi [11], ma l'uso del principio variazionale è una valida alternativa. Le teorie HNC e FHNC, utilizzate per descrivere sistemi infiniti come materia nucleare e neutronica ed elio liquido, ma oggi sviluppate anche per sistemi finiti come nuclei e cluster metallici, sono ottenute applicando il principio variazionale.

Il confronto tra diverse teorie che studiano lo stesso problema da punti di vista differenti è estremamente utile e proficuo.

È parte della storia della fisica nucleare che, negli anni '80 del secolo scorso, l'inconsistenza tra i risultati ottenuti con il principio variazionale e quelli di altre teorie abbia permesso di evidenziare alcune inconsistenze nelle approssimazioni comunemente adottate nei calcoli fatti con queste ultime [12].

Ci sono altre importanti applicazioni del principio variazionale nella fisica dei molti corpi che non ho discusso, ad esempio la sua applicazione nella descrizione di sistemi superfluidi e superconduttivi. Ho scelto esempi che mi hanno permesso di mettere in evidenza l'utilità del principio variazionale nell'affrontare i problemi chiave di questo ambito di ricerca.

- [1] M. H. Kalos, *Stochastic wave function for atomic helium*, J. Comp. Phys. 2 (1967) 257.
- [2] S. C. Pieper and R. B. Wiringa, *Quantum Monte Carlo calculations of light nuclei*, Annu. Rev. Nucl. Part. Sc., 51 (2001) 53.
- [3] J. C. Slater, *The theory of complex spectra*, Phys. Rev. 34 (1929) 1293.
- [4] D. R. Hartree, *The distribution of charge and current in an atom consisting of many electrons obeying Dirac's equations*, Proc. Camb. Phil. Soc. 24 (1924) 89
- [5] V. Fock, *Näherungsmethode zur Lösung des quantenmechanischen Mehrkörperproblems*, Z. Physik, 61 (1930) 126.
- [6] T. Koopman, *Über die Zuordnung von Wellenfunktionen und Eigenwerten zu den Einzelnen Elektronen Eines Atoms*, Physica 1 (1934) 104.
- [7] R. Jastrow, *Many-Body Problem with Strong Forces*, Phys. Rev. 98 (1955) 1479.
- [8] J. E. Mayer and M. G. Mayer, *Statistical mechanics*, New York, Wiley, 1940.
E. Feenberg, *Theory of Quantum Fluids*, Academic Press, New York, 1969.
D. L. Goodstein, *States of matter*, Prentice-Hall, Englewood Cliffs, NJ, 1975.
- [9] S. Fantoni and S. Rosati, *Jastrow correlations and an irreducible cluster expansion for infinite boson or fermion systems*, Nuov. Cim. A20 (1974) 179.
V. R. Pandharipande and R. B. Wiringa, *Variations on a theme of nuclear matter*, Rev. Mod. Phys. 51 (1979) 821.
S. Rosati, *FHNC. Variational theory for strongly interacting Fermi systems*, From nuclei to particles, LXXIX Corso Soc. Italiana di Fisica, Bologna, 1981.
- [10] F. Arias de Saavedra, C. Bisconti, G. Co' and A. Fabrocini, Phys. Rep. 450 (2007) 1.
- [11] A. A. Abrikosov, L. P. Gorkov and I. E. Dzyaloshinski, *Methods of quantum field theory in statistical mechanics*, Prentice-Hall, Englewood Cliffs, NJ, 1963.
R. D. Mattuck, *A guide to Feynmann diagrams in the many-body problem*, McGraw-Hill, New York, 1967.
A. L. Fetter and J. D. Walecka, *Quantum theory of many-particle systems*, McGraw-Hill, New York, 1971.
- [12] R. Guardiola and J. Ros Eds., *The many-body problem. Jastrow correlations versus Brueckner theory*, Proc. Third Topical School, Granada 1980, Lecture Notes in Physics 138, Springer-Verlag Berlin Heidelberg 1981.

Giampaolo Co': Professore associato di Fisica Nucleare presso l'Università del Salento si occupa di teorie a molti corpi applicate allo studio della struttura dei nuclei atomici.

