UNIVERSITÀ DEGLI STUDI DI TORINO
Dipartimento di Fisica Teorica

TEORIA DEI SISTEMI A MOLTI CORPI

Wanda M. Alberico e Alfredo Molinari

Indice

Capitolo 1

Seconda quantizzazione

1.1 Equazione di Schrödinger per un sistema a N corpi

L'Hamiltoniana di un sistema a N corpi interagenti solo tramite forze a due corpi è

$$H = \sum_{k=1}^{N} T(x_k) + \frac{1}{2} \sum_{k,l=1,(k\neq l)}^{N} V(x_k, x_l) \tag{1.1}$$

e l'equazione di Schrödinger *dipendente dal tempo*

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(x_1 \dots x_N, t) = H\psi(x_1 \dots x_N, t) \quad . \tag{1.2}$$

Si sviluppi ora la funzione d'onda globale in prodotti di funzioni d'onda di particella singola indipendenti dal tempo $\psi_{\alpha_k}(x_k)$, dove α_k è l'insieme dei numeri quantici necessari per specificare lo stato di particella singola

$$\psi(x_1 \dots x_N, t) = \sum_{\alpha'_1 \dots \alpha'_N} C(\alpha'_1 \dots \alpha'_N, t) \psi_{\alpha'_1}(x_1) \dots \psi_{\alpha'_N}(x_N) \,. \tag{1.3}$$

Si noti che gli stati di particella singola debbono incorporare le condizioni al contorno: per un sistema omogeneo di grandi dimensioni (invarianza traslazionale) onde piane normalizzate in scatola, per elettroni interagenti in un atomo funzioni d'onda Coulombiane, per elettroni che si muovono in una struttura cristallina funzioni d'onda di Bloch.

Per determinare i coefficienti dello sviluppo si moltiplichi l'equazione di Schrödinger (1.2) a sinistra per la funzione d'onda aggiunta

$$\psi^{\dagger}_{\alpha_1}(x_1) \dots \psi^{\dagger}_{\alpha_N}(x_N) \qquad \underline{\text{con } \alpha_1 \dots \alpha_N \text{ fissati}}$$

e si integri su tutto lo spazio (ciò implica anche somme sullo spin, se le particelle hanno spin). Si ottiene:

$$
\begin{aligned}
& i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\sum_{\alpha'_1\dots\alpha'_N} C(\alpha'_1\dots\alpha'_N,t)\times \\
& \times\left\{\int dx_1\dots dx_N \psi^\dagger_{\alpha_1}(x_1)\dots\psi^\dagger_{\alpha_N}(x_N)\psi_{\alpha'_1}(x_1)\dots\psi_{\alpha'_N}(x_N)\right\} = \\
& = \sum_{\alpha'_1\dots\alpha'_N} C(\alpha'_1\dots\alpha'_N,t)\times \\
& \times\left\{\int dx_1\dots dx_N \psi^\dagger_{\alpha_1}(x_1)\dots\psi^\dagger_{\alpha_N}(x_N)H\psi_{\alpha'_1}(x_1)\dots\psi_{\alpha'_N}(x_N)\right\}
\end{aligned}
$$

da cui segue

$$
\begin{aligned}
& i\hbar\frac{\partial}{\partial t}C(\alpha_1\dots\alpha_N,t) = \qquad (1.4)\\
& = \sum_{k=1}^{N}\sum_{\alpha'_1\dots\alpha'_N} C(\alpha'_1\dots\alpha'_N,t)\left\{\int dx_1\dots dx_{k-1}dx_{k+1}\dots dx_N\right. \\
& \left[\ \psi^\dagger_{\alpha_1}(x_1)\dots\psi^\dagger_{\alpha_{k-1}}(x_{k-1})\psi^\dagger_{\alpha_{k+1}}(x_{k+1})\dots\psi^\dagger_{\alpha_N}(x_N)\ \right]\times \\
& \left.\times\left[\ \psi_{\alpha'_1}(x_1)\dots\psi_{\alpha'_{k-1}}(x_{k-1})\psi_{\alpha'_{k+1}}(x_{k+1})\dots\psi_{\alpha'_N}(x_N)\ \right]\right\} \\
& \times\int dx_k\psi^\dagger_{\alpha_k}(x_k)T(x_k)\psi_{\alpha'_k}(x_k) + \\
& +\frac{1}{2}\sum_{k,l=1,(k\neq l)}^{N}\sum_{\alpha'_1\dots\alpha'_N} C(\alpha'_1\dots\alpha'_N,t)\times \\
& \times\left\{\int dx_1\dots dx_N\psi^\dagger_{\alpha_1}(x_1)\dots\psi^\dagger_{\alpha_N}(x_N)\psi_{\alpha'_1}(x_1)\dots\psi_{\alpha'_N}(x_N)\right\}\times \\
& \times\int dx_k dx_l\psi^\dagger_{\alpha_k}(x_k)\psi^\dagger_{\alpha_l}(x_l)V(x_k,x_l)\psi_{\alpha'_k}(x_k)\psi_{\alpha'_l}(x_l)\,.
\end{aligned}
$$

Quindi, per l'ortonormalità delle funzioni d'onda di particella singola e indicando con β e β' (anzichè α'_k e α'_l) gli indici (muti) su cui si somma, si ottiene

$$
\begin{aligned}
& i\hbar\frac{\partial}{\partial t}C(\alpha_1\dots\alpha_N,t) = \qquad (1.5)\\
& = \sum_{k=1}^{N}\sum_{\beta} C(\alpha_1\dots\alpha_{k-1}\beta\alpha_{k+1}\dots\alpha_N,t)\int dx_k\psi^\dagger_{\alpha_k}(x_k)T(x_k)\psi_\beta(x_k) +
\end{aligned}
$$

$$+\frac{1}{2}\sum_{k,l=1,(k\neq l)}^{N}\sum_{\beta\beta'}C(\alpha_1\dots\alpha_{k-1}\beta\alpha_{k+1}\dots\alpha_{l-1}\beta'\alpha_{l+1}\dots\alpha_N,t)\times$$
$$\times\int dx_k dx_l \psi^\dagger_{\alpha_k}(x_k)\psi^\dagger_{\alpha_l}(x_l)V(x_k,x_l)\psi_\beta(x_k)\psi_{\beta'}(x_l)\,.$$

e cioé un sistema di infinite equazioni differenziali accoppiate, lineari, del prim'ordine.

1.2 Statistica delle particelle

L'Hamiltoniana $H(1,2\dots N)$ [si veda per es. la (1.1)] di un sistema di N particelle identiche è completamente simmetrica per lo scambio dei suoi argomenti, quindi é invariante per un qualunque scambio delle N particelle fra di loro.

Sia allora $\phi(1,2\dots N)$ una qualunque soluzione dell'equazione di Schrödinger stazionaria

$$H(1,2\dots N)\phi(1,2\dots N) = E\phi(1,2\dots N) \tag{1.6}$$

e sia P un qualunque elemento del gruppo delle permutazioni di N oggetti. Ciascuna permutazione P di N particelle é un operatore lineare che puó essere applicato a qualunque stato descrivente il sistema. In virtú della simmetria di H e della conseguente invarianza rispetto alla permutazione dei suoi argomenti ($PHP^{-1} = H$), sará $[P,H] = 0$ e quindi dalla (1.6) si ottiene

$$H(P\phi) = PH\phi = PE\phi = E(P\phi)\,. \tag{1.7}$$

Pertanto

1. se $\phi(1,2\dots N)$ è un'autofunzione stazionaria di H, tale è anche $P\phi$
2. di tali funzioni ne esistono $N!$
3. esse, in generale, sono tutte degeneri (appartengono al medesimo autovalore $\Rightarrow$ degenerazione di scambio); ma generalmente non sono tutte linearmente indipendenti.

Osserviamo ora che anche di funzioni d' onda *time-dependent*

$$\Psi(x_1\dots x_N t)$$

ne esistono $N!$. Poiché esse obbediscono all' equazione di Schrödinger dipendente dal tempo

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(1,2\ldots Nt) = H(1,2\ldots N)\Psi(1,2\ldots Nt)$$

qualunque sia la funzione d'onda (delle $N!$) che descrive il sistema all'istante $t = t_0$, essa continuerà a descriverlo negli istanti successivi.

In particolare *se una funzione d'onda ha una simmetria definita, tale simmetria si conserva.* Supponiamo infatti che la soluzione sia, per esempio, simmetrica e chiamiamola $\Psi_S(1,2\ldots Nt)$. Allora anche $H\Psi_S$ lo sarà e, in virtù dell'equazione di Schrödinger, anche $\frac{\partial\Psi_S}{\partial t}$. Ma se Ψ_S e $\frac{\partial\Psi_S}{\partial t}$ sono simmetriche all'istante t, Ψ_S lo sará anche all' istante $t + dt$ e cosí via per qualunque intervallo di tempo.

Ancora sugli stati stazionari

Fra i vari livelli energetici di H ve ne saranno alcuni non degeneri. In questo caso la funzione d'onda $P\phi(1,2\ldots N)$ deve essere semplicemente un multiplo di $\phi(1,2\ldots N)$, poiché, per ipotesi, $\phi(1,2\ldots N)$ è l'unica soluzione per un dato autovalore. Inoltre, poiché $P\phi$ e ϕ hanno la stessa norma, esse differiranno al più per una fase, ossia:

$$P\phi(1,2\ldots N) = e^{i\alpha}\phi(1,2\ldots N)\,. \tag{1.8}$$

Si consideri ora una permutazione particolarmente semplice, e cioè lo scambio di i con j. Avremo

$$P_{ij}\phi(1,2\ldots i\ldots j\ldots N) = \phi(1,2\ldots j\ldots i\ldots N)$$

dove, se vogliamo che non ci sia degenerazione,

$$\phi(1,2\ldots j\ldots i\ldots N) = e^{i\alpha}\phi(1,2\ldots i\ldots j\ldots N) \tag{1.9}$$

Applichiamo ora ai due membri della (1.9) l' operatore P_{ij}, ottenendo
I^0 membro

$$P_{ij}\phi(1,2\ldots j\ldots i\ldots N) = \phi(1,2\ldots i\ldots j\ldots N)$$

II^0 membro

$$\begin{aligned} e^{i\alpha}P_{ij}\phi(1,2\ldots i\ldots j\ldots N) &= e^{i\alpha}\phi(1,2\ldots j\ldots i\ldots N) \\ &= e^{2i\alpha}\phi(1,2\ldots i\ldots j\ldots N) \end{aligned}$$

da cui segue

$$e^{2i\alpha} = 1 \quad \Rightarrow \quad e^{i\alpha} = \pm 1\,.$$

OSSERVAZIONE SPERIMENTALE

Della grande moltitudine di soluzioni matematiche dell'equazione agli autovalori

$$H(1,2\dots N)\phi(1,2\dots N) = E\phi(1,2\dots N)$$

la natura ha scelto quelle **non degeneri**, che, per quanto visto in precedenza,hanno una definita simmetria. Più precisamente possono essere:

1. totalmente simmetriche (non cambiano di segno per lo scambio di due particelle qualsiasi). Questo é il caso delle particelle con spin intero, dette **BOSONI**

2. totalmente antisimmetriche (cambiano di segno per lo scambio di due particelle qualsiasi). Questo é il caso delle particelle con spin semiintero dette **FERMIONI**.

Pertanto mediante gli $N!$ stati degeneri (ottenuti per permutazioni delle N particelle), soluzioni dell'equazione di Schrödinger, si dovranno formare o una combinazione totalmente simmetrica o una combinazione totalmente antisimmetrica (rispetto allo scambio di due qualsiasi particelle del sistema). Si può dimostrare che queste sono uniche.

Notiamo ancora che, data un'Hamiltoniana H, che è simmetrica rispetto allo scambio di particelle identiche, non è possibile considerare, come suoi autostati, sia soluzioni simmetriche ($\psi_m^{(+)}$) che soluzioni antisimmetriche ($\psi_n^{(-)}$). Sia infatti O un generico operatore che agisce sullo stesso sistema (ed è a sua volta simmetrico rispetto allo scambio di particelle identiche); si ha:

$$\begin{aligned}\left(\psi_m^{(+)}, O\psi_n^{(-)}\right) &= \left(\psi_m^{(+)}, P^{-1}OP\psi_n^{(-)}\right) = \\ &= \left(P\psi_m^{(+)}, OP\psi_n^{(-)}\right) = -\left(\psi_m^{(+)}, O\psi_n^{(-)}\right) = 0, \end{aligned} \tag{1.10}$$

dove P è un operatore unitario che scambia due particelle. La proprietà espressa dalla (1.10) è detta regola di superselezione.

TEOREMA SUI COEFFICIENTI

La simmetria della funzione d'onda si riflette sulla simmetria dei coefficienti dello sviluppo. Infatti la condizione necessaria e sufficiente affinché $\Psi(x_1 \dots x_N t)$ sia simmetrica o antisimmetrica nello scambio delle x è che i coefficienti $C(\alpha_1 \dots \alpha_N, t)$ siano simmetrici o antisimmetrici nello scambio delle α, e cioè che sia

$$C(\alpha_1 \dots \alpha_i \dots \alpha_j \dots \alpha_N, t) = \pm C(\alpha_1 \dots \alpha_j \dots \alpha_i \dots \alpha_N, t) \tag{1.11}$$

Sufficienza
Sia

$$\Psi(x_1..x_i..x_j..x_N t) = \sum_{\alpha_1..\alpha_N} C(\alpha_1..\alpha_i..\alpha_j..\alpha_N, t)\psi_{\alpha_1}(x_1)..\psi_{\alpha_i}(x_i)..\psi_{\alpha_j}(x_j)..\psi_{\alpha_N}(x_N)$$

Da essa, scambiando $x_i \Longleftrightarrow x_j$ e successivamente $\alpha_i \Longleftrightarrow \alpha_j$ (cosa lecita perchè si tratta di variabili mute, su cui si somma), si ottiene

$$\begin{aligned}\Psi(x_1..x_j..x_i..x_N, t) = \\ &= \sum_{\alpha_1..\alpha_N} C(\alpha_1..\alpha_i..\alpha_j..\alpha_N, t)\psi_{\alpha_1}(x_1)..\psi_{\alpha_i}(x_j)..\psi_{\alpha_j}(x_i)..\psi_{\alpha_N}(x_N) = \\ &= \sum_{\alpha_1..\alpha_N} C(\alpha_1..\alpha_j..\alpha_i..\alpha_N, t)\psi_{\alpha_1}(x_1)..\psi_{\alpha_j}(x_j)..\psi_{\alpha_i}(x_i)..\psi_{\alpha_N}(x_N)\end{aligned}$$

Ora, in virtù della (1.11), otteniamo:

$$\begin{aligned}\Psi(x_1..x_j..x_i..x_N, t) = \\ &= \pm \sum_{\alpha_1..\alpha_N} C(\alpha_1..\alpha_i..\alpha_j..\alpha_N, t)\psi_{\alpha_1}(x_1)..\psi_{\alpha_i}(x_i)..\psi_{\alpha_j}(x_j)..\psi_{\alpha_N}(x_N) \\ &= \pm\Psi(x_1..x_i..x_j..x_N, t)\end{aligned}$$

Necessità

La definizione dei C è:

$$\begin{aligned}C(\alpha_1..\alpha_i..\alpha_j..\alpha_N, t) = \\ = \int dx_1..dx_N \psi^\dagger_{\alpha_1}(x_1)..\psi^\dagger_{\alpha_i}(x_i)\psi^\dagger_{\alpha_j}(x_j)..\psi^\dagger_{\alpha_N}(x_N)\Psi(x_1..x_i..x_j..x_N, t)\,.\end{aligned}$$

Ora, scambiando $x_i \Longleftrightarrow x_j$, non cambia nulla perché le variabili sono integrate, dunque

$$\begin{aligned}C(\alpha_1..\alpha_i..\alpha_j..\alpha_N, t) = \\ = \int dx_1..dx_N \psi^\dagger_{\alpha_1}(x_1)..\psi^\dagger_{\alpha_i}(x_j)\psi^\dagger_{\alpha_j}(x_i)..\psi^\dagger_{\alpha_N}(x_N)\Psi(x_1..x_j..x_i..x_N, t) \\ = \pm \int dx_1..dx_N \psi^\dagger_{\alpha_1}(x_1)..\psi^\dagger_{\alpha_i}(x_j)\psi^\dagger_{\alpha_j}(x_i)..\psi^\dagger_{\alpha_N}(x_N)\Psi(x_1..x_i..x_j..x_N, t)\end{aligned}$$

che, per confronto con la definizione, implica la relazione

$$C(\alpha_1..\alpha_i..\alpha_j..\alpha_N, t) = \pm C(\alpha_1..\alpha_j..\alpha_i..\alpha_N, t)$$

1.3 Bosoni

Per queste particelle la funzione d'onda deve essere totalmente simmetrica: pertanto anche i coefficienti $C(\alpha_1 \ldots \alpha_N, t)$ debbono essere tali. Possiamo quindi riorganizzare gli N argomenti dei C nel modo seguente:

$$\begin{aligned} C(\alpha_1 \ldots \alpha_N, t) &= C(\alpha_9 \alpha_2 \alpha_1 \alpha_5 \alpha_7 \alpha_2 \alpha_{13} \ldots, t) \\ &= C(\underbrace{\alpha_1 \alpha_1 \alpha_1}_{n_1} \ldots \underbrace{\alpha_2 \alpha_2 \alpha_2}_{n_2} \ldots \underbrace{\alpha_3 \alpha_3 \alpha_3}_{n_3} \ldots, t) \end{aligned}$$

dove gli n rappresentano i **numeri di occupazione** degli stati di particella singola α_1, α_2 etc. ect.

Tutti quei termini, nello sviluppo della funzione d'onda, che hanno n_1 particelle nello stato α_1, n_2 particelle nello stato α_2 e cosí via, hanno pertanto lo stesso coefficiente. Possiamo quindi definire dei nuovi coefficienti in termini dei numeri di occupazione:

$$\widetilde{C}(n_1 n_2 \ldots n_\infty, t) \equiv C(\alpha_1 \alpha_1 \alpha_1 \ldots \alpha_2 \alpha_2 \alpha_2 \ldots, t) \tag{1.12}$$

con il vincolo

$$\sum_{i=1}^{\infty} n_i = N \tag{1.13}$$

essendo N il numero di particelle che compongono il sistema (e che quindi è fissato).

Osserviamo ora che la condizione di normalizzazione della funzione d'onda

$$\int |\Psi|^2 dx_1 \ldots dx_N = 1$$

implica che

$$\sum_{\alpha_1 \ldots \alpha_N} |C(\alpha_1 \ldots \alpha_N, t)|^2 = 1 \quad \text{ad ogni tempo.}$$

Questa ultima relazione contiene tutti i coefficienti $C(\alpha_1 \ldots \alpha_N, t)$, *anche quelli che sono uguali a causa della simmetria della funzione d'onda bosonica.* Conviene allora riscrivere la somma dei moduli quadrati dei coefficienti come segue:

$$\sum_{n_1 \ldots n_\infty} \left[\left| \widetilde{C}(n_1 \ldots n_\infty, t) \right|^2 \sum_{\substack{\alpha_1 \ldots \alpha_N \\ [n_1 \ldots n_\infty]}} 1 \right] = 1\,.$$

Ossia prima si fissano i numeri di occupazione $n_1, n_2 \dots n_\infty$, compatibilmente con il vincolo $\sum_{i=1}^{\infty} n_i = N$, e poi *si somma su tutti i possibili modi di disporre N particelle negli stati quantici di particella singola fissati dal set di numeri di occupazione* $n_1, n_2 \dots n_\infty$. Si noti che poiché $\sum_{i=1}^{\infty} n_i = N$ molti (in realtà infiniti) n_i debbono essere zero.

Il calcolo combinatorio fornisce:

$$\sum_{\substack{\alpha_1 \dots \alpha_N \\ [n_1 \dots n_\infty]}} 1 = \frac{N!}{n_1! n_2! \dots n_\infty!} \qquad \text{(si ricordi che } 0! = 1)$$

dunque la condizione di normalizzazione per i $\widetilde{C}$ diventa

$$\sum_{n_1 \dots n_\infty} \frac{N!}{n_1! n_2! \dots n_\infty!} \left| \widetilde{C}(n_1 n_2 \dots n_\infty, t) \right|^2 = 1\,.$$

Conviene pertanto definire nuovi coefficienti

$$f(n_1 n_2 \dots n_\infty, t) = \sqrt{\frac{N!}{n_1! n_2! \dots n_\infty!}}\, \widetilde{C}(n_1 n_2 \dots n_\infty, t)\,, \tag{1.14}$$

in termini dei quali la condizione di normalizzazione della funzione d'onda si esprime in modo particolarmente semplice e cioé

$$\sum_{n_1 n_2 \dots n_\infty} |f(n_1 n_2 \dots n_\infty, t)|^2 = 1\,. \tag{1.15}$$

Scriveremo allora la funzione d'onda bosonica nel seguente modo:

$$\begin{aligned}
\Psi(x_1 \dots x_N, t) &= \sum_{\alpha_1 \dots \alpha_N} C(\alpha_1 \dots \alpha_N, t) \psi_{\alpha_1}(x_1) \dots \psi_{\alpha_N}(x_N) \\
&= \sum_{\alpha_1 \dots \alpha_N} \widetilde{C}(n_1 \dots n_\infty, t) \psi_{\alpha_1}(x_1) \dots \psi_{\alpha_N}(x_N) \\
&= \sum_{n_1 \dots n_\infty} f(n_1 \dots n_\infty, t) \sqrt{\frac{n_1! n_2! \dots n_\infty!}{N!}} \sum_{\substack{\alpha_1 \dots \alpha_N \\ [n_1 \dots n_\infty]}} \psi_{\alpha_1}(x_1) \dots \psi_{\alpha_N}(x_N) \\
&= \sum_{n_1 .. n_\infty} f(n_1 .. n_\infty, t) \phi_{n_1 .. n_\infty}(x_1 .. x_N)\,,
\end{aligned}$$

una relazione che esprime la completezza delle $\phi_{n_1 .. n_\infty}(x_1 .. x_N)$.[1] Queste ultime rappresentano le funzioni d'onda di base completamente simmetriche

[1] Si noti che ad un C corrisponde un $\widetilde{C}$, mentre ad un $\widetilde{C}$ corrispondono in genere molti C.

per un sistema di N bosoni identici, che possono disporsi su infiniti livelli di particella singola, e sono cosí definite:

$$\begin{aligned}
&\phi_{n_1 n_2 \dots n_\infty}(x_1 x_2 \dots x_N) = \\
&\quad = \sqrt{\frac{n_1! n_2! \dots n_\infty!}{N!}} \sum_{\substack{\alpha_1 \dots \alpha_N \\ [n_1 \dots n_\infty]}} \psi_{\alpha_1}(x_1) \dots \psi_{\alpha_N}(x_N) \, . \qquad (1.16)
\end{aligned}$$

Proprietà delle funzioni d'onda bosoniche
Simmetria:

$$\phi_{n_1 n_2 \dots n_\infty}(x_1 .. x_i \dots x_j .. x_N) = \phi_{n_1 n_2 .. n_\infty}(x_1 .. x_j \dots x_i .. x_N)$$

Ortonormalità:

$$\begin{aligned}
&\int dx_1 dx_2 \dots dx_N \phi^\dagger_{n'_1 n'_2 \dots n'_\infty}(x_1 \dots x_N) \phi_{n_1 n_2 \dots n_\infty}(x_1 \dots x_N) = \\
&\quad = \delta_{n'_1 n_1} \delta_{n'_2 n_2} \dots \delta_{n'_\infty n_\infty}
\end{aligned}$$

Chiusura/completezza:

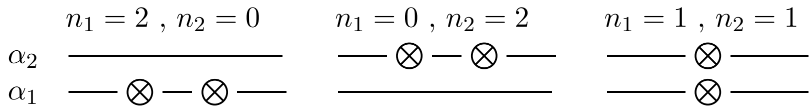
$$\begin{aligned}
&\sum_{n_1 \dots n_\infty} \phi^\dagger_{n_1 n_2 \dots n_\infty}(x'_1 x'_2 \dots x'_N) \phi_{n_1 n_2 \dots n_\infty}(x_1 x_2 \dots x_N) = \\
&= \delta(x_1 - x'_1) \delta(x_2 - x'_2) \dots \delta(x_N - x'_N)
\end{aligned}$$

Esempio: funzione d'onda di 3 bosoni; 2 nello stato fondamentale, 1 nel primo stato eccitato

$$\begin{aligned}
\phi_{21\dots}(\vec{x}_1, \vec{x}_2, \vec{x}_3) \quad &= \frac{1}{\sqrt{3}} \{ \psi_1(\vec{x}_1) \psi_1(\vec{x}_2) \psi_2(\vec{x}_3) + \psi_1(\vec{x}_1) \psi_1(\vec{x}_3) \psi_2(\vec{x}_2) + \\
&+ \psi_1(\vec{x}_3) \psi_1(\vec{x}_2) \psi_2(\vec{x}_1) \} \, .
\end{aligned}$$

Esempio illustrativo sulla normalizzazione bosonica

a) due particelle in due livelli (3 possibili scelte per i numeri di occupazione e quindi 3 componenti della funzione d' onda globale)



Si noti che si omette per brevitá il tempo nello sviluppo delle sommatorie seguenti:

$$\sum_{\alpha'_1\alpha'_2} |C(\alpha'_1,\alpha'_2)|^2 =$$
$$= |C(\alpha_1,\alpha_1)|^2 + |C(\alpha_1,\alpha_2)|^2 + |C(\alpha_2,\alpha_1)|^2 + |C(\alpha_2,\alpha_2)|^2$$
$$= |C(\alpha_1,\alpha_1)|^2 + 2|C(\alpha_1,\alpha_2)|^2 + |C(\alpha_2,\alpha_2)|^2 = 1$$

$$\sum_{n'_1n'_2} |\widetilde{C}(n'_1,n'_2,t)|^2 \frac{2!}{n'_1!n'_2!} =$$
$$= |\widetilde{C}(2,0)|^2 + 2|\widetilde{C}(1,1)|^2 + |\widetilde{C}(0,2)|^2 = 1$$
$$= |f(2,0)|^2 + |f(1,1)|^2 + |f(0,2)|^2$$

b) tre particelle in due livelli (4 possibili scelte per i numeri di occupazione)

	$n_1 = 3$, $n_2 = 0$	$n_1 = 0, n_2 = 3$	$n_1 = 2, n_2 = 1$	$n_1 = 1, n_2 = 2$
α_2	———	$-\otimes-\otimes-\otimes-$	$—\otimes—$	$-\otimes-\otimes-$
α_1	$-\otimes-\otimes-\otimes-$	———	$-\otimes-\otimes-$	$—\otimes—$

$$\sum_{\alpha'_1\alpha'_2\alpha'_3} |C(\alpha'_1,\alpha'_2,\alpha'_3,t)|^2 =$$
$$= |C(\alpha_1,\alpha_1,\alpha_1)|^2 + |C(\alpha_1,\alpha_1,\alpha_2)|^2 + |C(\alpha_1,\alpha_2,\alpha_1)|^2 + |C(\alpha_2,\alpha_1,\alpha_1)|^2$$
$$+ |C(\alpha_1,\alpha_2,\alpha_2)|^2 + |C(\alpha_2,\alpha_1,\alpha_2)|^2 + |C(\alpha_2,\alpha_2,\alpha_1)|^2 + |C(\alpha_2,\alpha_2,\alpha_2)|^2 =$$
$$= |C(\alpha_1,\alpha_1,\alpha_1)|^2 + 3|C(\alpha_1,\alpha_1,\alpha_2)|^2 + 3|C(\alpha_2,\alpha_2,\alpha_1)|^2 + |C(\alpha_2,\alpha_2,\alpha_2)|^2$$

$$\sum_{n'_1n'_2} |\widetilde{C}(n'_1,n'_2,t)|^2 \frac{3!}{n'_1!n'_2!} =$$
$$= |\widetilde{C}(3,0)|^2 + 3|\widetilde{C}(2,1)|^2 + 3|\widetilde{C}(1,2)|^2 + |\widetilde{C}(0,3)|^2 = 1$$
$$= |f(3,0)|^2 + |f(2,1)|^2 + |f(1,2)|^2 + |f(0,3)|^2 = 1$$

1.4 Funzioni d'onda di base bosoniche ed equazioni per i coefficienti dello sviluppo

Fissato il numero di particelle N e un insieme di numeri di occupazione $n_1, n_2 \dots n_\infty$ tale che $\sum_{i=1}^{\infty} n_i = N$, *il numero di componenti che entrano in un dato vettore di base simmetrico* è:

$$\frac{N!}{n_1!n_2!\dots n_\infty!}$$

Pertanto se <u>tutte</u> le N particelle sono in un <u>solo</u> livello, per es. il primo, allora $n_1 = N$, $n_2 = 0$ etc. etc. e il vettore $\phi_{N,0,...}(x_1 \dots x_N)$ avrá <u>una sola</u> componente.

L'estremo opposto si verifica quando gli N bosoni sono distribuiti, uno per livello, su N livelli distinti. In questo caso il vettore $\phi_{1,1,1..0,0..}(x_1, x_2..x_N)$ avrà $N!$ componenti e la sua espressione esplicita si ottiene dal <u>permanente</u> della matrice $N \times N$ costruita a partire dagli N livelli e dalle N particelle. Ricordiamo che il *permanente* di una matrice quadrata di tipo $m \times m$ è definito come la somma degli $m!$ possibili prodotti, ciascuno dei quali ottenuto moltiplicando tra loro m elementi presi ognuno da righe distinte (in pratica è un "determinante" calcolato sostituendo con dei $+$ i vari segni $-$ dati dalle permutazioni di ordine dispari).

Ci possiamo ora chiedere quanti sono i vettori di base per un sistema di N bosoni identici collocati in $\mathcal{N}$ livelli. La risposta è data dal calcolo combinatorio che fornisce:

$$\begin{pmatrix} N + \mathcal{N} - 1 \\ N \end{pmatrix} = \frac{(N + \mathcal{N} - 1)!}{N!(\mathcal{N} - 1)!}.$$

Riprendiamo ora l'equazione (1.5) per i coefficienti usando la notazione di Dirac e cioè:

$$\int dx_k \psi^\dagger_{\alpha_k}(x_k) T(x_k) \psi_\beta(x_k) \equiv \langle \alpha_k | T | \beta \rangle$$

$$\int dx_k dx_l \psi^\dagger_{\alpha_k}(x_k) \psi^\dagger_{\alpha_l}(x_l) V(x_k, x_l) \psi_\beta(x_k) \psi_{\beta'}(x_l) \equiv \langle \alpha_k \alpha_l | V | \beta\beta' \rangle$$

e introducendo i coefficienti $\widetilde{C}$, le equazioni del sistema si riscriveranno come segue:

$$\begin{aligned} & i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \widetilde{C}(n_{\alpha_1} \dots n_{\alpha_\infty}, t) = \qquad (1.17) \\ & = \sum_{k=1}^{N} \sum_\beta \langle \alpha_k | T | \beta \rangle \widetilde{C}(n_{\alpha_1} \dots (n_{\alpha_k} - 1) \dots (n_\beta + 1) \dots n_{\alpha_\infty}, t) + \\ & \quad + \frac{1}{2} \sum_{k,l=1 (k \neq l)}^{N} \sum_{\beta\beta'} \langle \alpha_k \alpha_l | V | \beta\beta' \rangle \times \\ & \times \widetilde{C}(n_{\alpha_1} .. (n_{\alpha_k} - 1) .. (n_\beta + 1) .. (n_{\alpha_l} - 1) .. (n_{\beta'} + 1) .. n_{\alpha_\infty}, t) \end{aligned}$$

dove gli stati di particella singola $\alpha_1 .. \alpha_k .. \alpha_l .. \alpha_\infty$ (e i loro relativi numeri di occupazione) sono <u>fissati</u>.

Consideriamo ora il termine cinetico il cui coefficiente $\widetilde{C}$ differisce da quello a primo membro poiché in esso lo stato α_k è occupato una volta in meno, i.e. $(n_{\alpha_k} - 1)$, e lo stato β, che è sommato, una volta di più, $(n_\beta + 1)$.

La somma sull'indice k delle particelle dà luogo a N termini in ciascuno dei quali l'operatore di energia cinetica trasferisce la particella che si trova nello stato β, rispettivamente, in ciascuno degli stati (N) di particella singola che compaiono al primo membro e che sono fissati dal "bra–vettore"

$$\psi^\dagger_{\alpha_1}(x_1)\psi^\dagger_{\alpha_2}(x_2)\ldots\psi^\dagger_{\alpha_N}(x_N)\,. \tag{1.18}$$

Ne segue che **se** gli stati della (1.18) sono tutti diversi (cioè se $\alpha_1 \neq \alpha_2 \neq \ldots \neq \alpha_N$) e ordinati, per esempio, in ordine crescente allora avremo

$$\begin{aligned}
&\sum_{k=1}^{N}\sum_\beta \langle\alpha_k|T|\beta\rangle\widetilde{C}(n_{\alpha_1}\ldots(n_{\alpha_k}-1)\ldots(n_\beta+1)\ldots n_{\alpha_\infty},t)\\
&=\sum_\beta\Big\{\langle\alpha_1|T|\beta\rangle\widetilde{C}[(n_{\alpha_1}-1)\ldots(n_\beta+1)\ldots n_{\alpha_\infty},t]\;+\\
&+\langle\alpha_2|T|\beta\rangle\widetilde{C}[n_{\alpha_1}(n_{\alpha_2}-1)\ldots(n_\beta+1)\ldots n_{\alpha_\infty},t]+\ldots+\\
&+\,\langle\alpha_N|T|\beta\rangle\widetilde{C}[n_{\alpha_1}\ldots(n_\beta+1)\ldots(n_{\alpha_N}-1)\ldots n_{\alpha_\infty},t]\Big\}\\
&=\sum_\beta\sum_{\alpha_k} n_{\alpha_k}\langle\alpha_k|T|\beta\rangle\widetilde{C}[n_{\alpha_1}\ldots(n_{\alpha_k}-1)\ldots(n_\beta+1)\ldots n_{\alpha_\infty},t]
\end{aligned} \tag{1.19}$$

in cui si è convertita la somma (su k) sulle particelle in somma sugli stati. Nella (1.19), ovviamente, n_{α_k} vale 1 quando α_k coincide con uno degli $\alpha_1, \alpha_2, \ldots \alpha_N$, zero altrimenti ($\alpha_1, \alpha_2, \ldots \alpha_N$ sono fissati dal vettore di stato (1.18)).

Se invece nello stato (1.18) esistono stati di particella singola uguali, allora ogniqualvolta α_k assume lo stesso valore (diciamo α), il che si verifica n_{α_k} volte (poniamo n_α), si ottiene lo stesso contributo alla sommatoria $\sum_k$, per cui anche qui sarà

$$\sum_{k=1}^{N}\sum_\beta\langle\alpha_k|T|\beta\rangle\ldots=\sum_{\alpha_k}\sum_\beta n_{\alpha_k}\langle\alpha_k|T|\beta\rangle\ldots=\sum_\alpha\sum_\beta n_\alpha\langle\alpha|T|\beta\rangle\ldots$$

ma n_α, in questo caso, è suscettibile di assumere valori > 1.

Con analogo procedimento scriveremo, per il termine potenziale

$$\frac{1}{2}\sum_{k,l=1}^{N}\sum_{\beta\beta'}\langle\alpha_k\alpha_l|V|\beta\beta'\rangle\;\times$$

$$
\begin{aligned}
&\times\widetilde{C}(n_{\alpha_1}..(n_{\alpha_k}-1)..(n_\beta+1)..(n_{\alpha_l}-1)..(n_{\beta'}+1)..n_{\alpha_\infty},t)\\
&-\frac{1}{2}\sum_{k=1}^{N}\sum_{\beta\beta'}\langle\alpha_k\alpha_k|V|\beta\beta'\rangle\widetilde{C}(n_{\alpha_1}..(n_{\alpha_k}-2)..(n_\beta+1)..(n_{\beta'}+1)..n_{\alpha_\infty},t)=\\
&=\frac{1}{2}\sum_{\alpha\alpha'}\sum_{\beta\beta'}n_\alpha(n_{\alpha'}-\delta_{\alpha\alpha'})\langle\alpha\alpha'|V|\beta\beta'\rangle\times\\
&\times\widetilde{C}(n_{\alpha_1}..(n_\alpha-1)..(n_\beta+1)..(n_{\alpha'}-1)..(n_{\beta'}+1)..n_{\alpha_\infty},t)\,. \qquad (1.20)
\end{aligned}
$$

Ogniqualvolta α_k assume lo stesso valore, diciamolo α, il che si verifica n_α volte, si produce lo stesso contributo alla somma su k ed ogniqualvolta α_l assume lo stesso valore, diciamolo α', il che si verifica $n_{\alpha'}$ volte, si avrà lo stesso contributo alla somma su l.

Si noti che il fattore $(n_{\alpha'}-\delta_{\alpha\alpha'})$ compare poiché nelle equazioni originali c'è la condizione $k\neq l$. Ovviamente quando $\alpha=\alpha'$ per il coefficiente $\widetilde{C}$ si deve intendere

$$\widetilde{C}(n_{\alpha_1}\dots(n_\alpha-2)\dots(n_\beta+1)\dots(n_{\beta'}+1)\dots n_{\alpha_\infty},t)\,.$$

Si ottiene pertanto, per i coefficienti $\widetilde{C}$, il seguente sistema di equazioni differenziali accoppiate

$$
\begin{aligned}
&i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\widetilde{C}(n_{\alpha_1}\dots n_{\alpha_\infty},t)=\\
&=\sum_{\alpha\beta}n_\alpha\langle\alpha|T|\beta\rangle\widetilde{C}(n_{\alpha_1}\dots(n_\alpha-1)\dots(n_\beta+1)\dots n_{\alpha_\infty},t)+\\
&\quad+\frac{1}{2}\sum_{\alpha\alpha'}\sum_{\beta\beta'}n_\alpha(n_{\alpha'}-\delta_{\alpha\alpha'})\langle\alpha\alpha'|V|\beta\beta'\rangle\times\\
&\times\widetilde{C}(n_{\alpha_1}\dots(n_\alpha-1)\dots(n_\beta+1)\dots(n_{\alpha'}-1)\dots(n_{\beta'}+1)\dots n_{\alpha_\infty},t)\,.
\end{aligned}
$$

dove le sommatorie sugli stati α e α' corrono sugli stati occupati a primo membro.

Partendo allora dall'equazione (1.5), introducendo i coefficienti $\widetilde{C}$ in funzione dei numeri di occupazione e ricordando la definizione di $f(n_{\alpha_1}\dots n_{\alpha_\infty},t)$, si ottiene:

$$
\begin{aligned}
&i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\sqrt{\frac{n_{\alpha_1}!\dots n_{\alpha_\infty}!}{N!}}f(n_{\alpha_1}\dots n_{\alpha_\infty},t)= \qquad (1.21)\\
&=\sum_{\alpha\beta}\langle\alpha|T|\beta\rangle f(n_{\alpha_1}..(n_\alpha-1)..(n_\beta+1)..n_{\alpha_\infty},t)\times\\
&\times\quad n_\alpha\sqrt{\frac{n_{\alpha_1}!..(n_\alpha-1)!..(n_\beta+1)!..n_{\alpha_\infty}!}{N!}}+
\end{aligned}
$$

$$+\frac{1}{2}\sum_{\alpha\alpha'}\sum_{\beta\beta'}\langle\alpha\alpha'|V|\beta\beta'\rangle f(n_{\alpha_1}..(n_\alpha-1)..(n_\beta+1)..(n_{\alpha'}-1)..(n_{\beta'}+1)..n_{\alpha_\infty},t)$$

$$\times n_\alpha(n_{\alpha'}-\delta_{\alpha\alpha'})\sqrt{\frac{n_{\alpha_1}!..(n_\alpha-1)!..(n_\beta+1)!..(n_{\alpha'}-1)!..(n_{\beta'}+1)!..n_{\alpha_\infty}!}{N!}}$$

che, semplificando e cambiando nome agli stati di particella singola,

$$\alpha \to i \quad \alpha' \to j \quad \beta \to k \quad \beta' \to l$$

diventa

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}f(n_1\dots n_\infty,t) = \tag{1.22}$$
$$= \sum_{ik}\langle i|T|k\rangle\sqrt{n_i(n_k+1)}f(n_1\dots(n_i-1)\dots(n_k+1)\dots n_\infty,t) +$$
$$+\frac{1}{2}\sum_{ijkl}\langle ij|V|kl\rangle n_i(n_j-\delta_{ij})\sqrt{\frac{(n_k+1)(n_l+1)}{n_i n_j}}\times$$
$$\times f(n_1..(n_i-1)..(n_k+1)..(n_j-1)..(n_l+1)..n_\infty,t)$$

Nel termine potenziale, quando $i=j$, ha da intendersi

$$f\,(n_1\dots(n_i-2)\dots(n_k+1)\dots(n_l+1)\dots n_\infty,t)$$

e il denominatore sotto radice va interpretato come $n_i(n_i-1)$. Quindi, cosí com'è scritto, il termine potenziale a secondo membro va bene solo quando $i\neq j\neq k\neq l$ (e quando $i=j\neq k\neq l$). Anche il termine cinetico, quando $i=k$, va scritto in modo diverso, tenendo presente che in questo caso la radice a primo membro è identica a quella che moltiplica il termine cinetico stesso a secondo membro nella (1.21).

Pertanto in modo più specifico scriveremo

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}f(n_1\dots n_\infty,t) = \sum_i\langle i|T|i\rangle n_i f(n_1\dots n_i\dots n_\infty,t) +$$
$$+\sum_{i\neq k}\langle i|T|k\rangle\sqrt{n_i(n_k+1)}f(n_1\dots(n_i-1)\dots(n_k+1)\dots n_\infty,t) +$$
$$+\frac{1}{2}\sum_{i\neq j\neq k\neq l}\langle ij|V|kl\rangle\sqrt{(n_k+1)(n_l+1)n_i n_j}\times$$
$$\times f(n_1\dots(n_i-1)\dots(n_k+1)\dots(n_j-1)\dots(n_l+1)\dots n_\infty,t) +$$
$$+\frac{1}{2}\sum_{i=j\neq k\neq l}\langle ii|V|kl\rangle\sqrt{(n_k+1)(n_l+1)(n_i-1)n_i}\times$$
$$\times f(n_1\dots(n_i-2)\dots(n_k+1)\dots(n_l+1)\dots n_\infty,t)$$

+ altri 13 termini di potenziale derivanti dalle varie uguaglianze e diseguaglianze degli indici i, j, k e l.

Elenco dei casi

$$
\begin{array}{lll}
i \neq j \neq k \neq l & j = i = k = l & i = j = k \neq l \\
i = j \neq k \neq l & j = k \neq i \neq l & i = j = l \neq k \\
i = k \neq j \neq l & j = l \neq i \neq k & i = k = l \neq j \\
i = l \neq j \neq k & k = l \neq i \neq j & j = k = l \neq i
\end{array}
$$

$$[i = j] \neq [k = l] \ , \ [i = k] \neq [j = l] \ , \ [i = l] \neq [j = k]$$

Quanti sono i casi possibili (derivanti dalle uguaglianze e disuguaglianze) quando il numero di indici è diverso da quattro, per esempio 6 (potenziali a tre corpi) oppure 8 (potenziali a quattro corpi)?

Il calcolo combinatorio fornisce per il caso generale di n indici il seguente risultato (formula ricorsiva di Aitken per il numero di Bell $\mathcal{B}_n$):

$$\mathcal{B}_n = \sum_{m=0}^{n-1} \binom{n-1}{m} \mathcal{B}_m \qquad \text{con}\, \mathcal{B}_0 \stackrel{def.}{=} 1 \,.$$

Numeri di Bell	
n	$\mathcal{B}_n$
0	1
1	1
2	2
3	5
4	15
5	52
6	203
7	877
8	4.140
9	21.147

1.5 Formulazione con operatori di creazione e distruzione bosonici

Abbiamo precedentemente visto che la funzione d'onda dipendente dal tempo per un sistema di N bosoni identici si sviluppa convenientemente nella forma:

$$\Psi(x_1 \dots x_N t) = \sum_{n_1 \dots n_\infty = 0}^{N} f(n_1 \dots n_\infty, t) \phi_{n_1 \dots n_\infty}(x_1 \dots x_N) \tag{1.23}$$

dove le $\phi_{n_1 \dots n_\infty}(x_1 \dots x_N)$ sono autostati completamente simmetrici dell'Hamiltoniana di N bosoni identici non interagenti ed i coefficienti $f(n_1..n_\infty, t)$ soddisfano al sistema di infinite equazioni differenziali accoppiate, lineari, del primo ordine (1.22).

Introduciamo ora una base meccanico–quantistica completamente diversa mediante i *vettori di stato indipendenti dal tempo*

$$|n_1 n_2 \dots n_\infty\rangle \tag{1.24}$$

nello spazio astratto dei numeri di occupazione.

La (1.24) implica che ci sono n_1 particelle nello stato di particella singola ψ_{α_1}, n_2 in ψ_{α_2} etc. etc.

Tali stati soddisfano alle relazioni di ortogonalità e completezza

$$\langle n'_1 n'_2 \dots n'_\infty | n_1 n_2 \dots n_\infty \rangle = \delta_{n'_1 n_1} \delta_{n'_2 n_2} \dots \delta_{n'_\infty n_\infty} \qquad \text{ortogonalitá}$$

$$\sum_{n_1 n_2 \dots n_\infty} |n_1 n_2 \dots n_\infty\rangle\langle n_1 n_2 \dots n_\infty| = 1 \qquad \text{completezza-chiusura}$$

Si noti che la sommatoria corre su tutti gli n_i possibili e quindi su tutti i possibili numeri di particelle (che caratterizzano lo spazio di Fock esteso).

In questo spazio astratto dei numeri di occupazione operano gli operatori bosonici di creazione $\hat{b}_k^\dagger$ e di distruzione $\hat{b}_k$, l'uno hermitiano coniugato dell'altro, la cui algebra è definita dai commutatori

$$\left[\hat{b}_k, \hat{b}_{k'}^\dagger\right] = \delta_{kk'}\,, \qquad \left[\hat{b}_k, \hat{b}_{k'}\right] = 0\,, \qquad \left[\hat{b}_k^\dagger, \hat{b}_{k'}^\dagger\right] = 0 \tag{1.25}$$

Allora, in luogo della (1.23), valida in I^a quantizzazione, adotteremo lo sviluppo in II^a quantizzazione

$$|\Psi(t)\rangle = \sum_{n_1 \dots n_\infty = 0}^{N} f(n_1 \dots n_\infty, t) |n_1 \dots n_\infty\rangle \tag{1.26}$$

(con $\sum_i n_i = N$, fissato) dove, ovviamente, a primo membro non compaiono più le coordinate.

Possiamo pertanto riscrivere l'equazione di Schrödinger

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\Psi(t)\rangle = \hat{H}|\Psi(t)\rangle \tag{1.27}$$

per questi nuovi vettori di stato. Avremo

$$\begin{aligned}
& i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\sum_{n_1\dots n_\infty=0}^{N} f(n_1\dots n_\infty,t)|n_1\dots n_\infty\rangle = \\
& \sum_{n_1\dots n_\infty=0}^{N}\Bigg\{\sum_{ik}\langle i|T|k\rangle\sqrt{n_i(n_k+1-\delta_{ik})}f(n_1..(n_i-1)..(n_k+1)..n_\infty,t) \\
& \quad +\frac{1}{2}\sum_{i\neq j\neq k\neq l}\langle ij|V|kl\rangle\sqrt{n_in_j(n_k+1)(n_l+1)} \\
& \quad \times f(n_1..(n_i-1)..(n_k+1)..(n_j-1)..(n_l+1)..n_\infty,t) \\
& \quad +\frac{1}{2}\sum_{i\neq k\neq l}\langle ii|V|kl\rangle\sqrt{n_i(n_i-1)(n_k+1)(n_l+1)} \\
& \quad \times f(n_1..(n_i-2)..(n_k+1)..(n_l+1)..n_\infty,t)+\dots\Bigg\}|n_1..n_\infty\rangle
\end{aligned}$$

Eseguiamo ora nell'energia cinetica il cambiamento di indici

$$n_i-1=n_i', \qquad n_k+1=n_k', \qquad n_l=n_l' \quad (\forall\ l\neq i\vee k)$$

lasciando ovviamente inalterata la somma sui numeri di occupazione:

$$\sum_{i=1}^{\infty}n_i=\sum_{i=1}^{\infty}n_i'=N\,.$$

Allora considerando, per esempio, il termine cinetico, nel caso $i \neq k$ avremo

$$\begin{aligned}
& \sum_{n_1'\dots n_\infty'=0}^{N}\ \sum_{ik}\langle i|T|k\rangle\sqrt{(n_i'+1)n_k'}f(n_1'\dots n_i'\dots n_k'\dots n_\infty',t)\times \\
& \times\quad |n_1'\dots(n_i'+1)\dots(n_k'-1)\dots n_\infty'\rangle\,.
\end{aligned}$$

Ma per le proprietà degli operatori bosonici (che discendono dall'algebra (1.25), come verrà illustrato in seguito) è:

$$\sqrt{(n_i'+1)n_k'}\,|n_1'..(n_i'+1)..(n_k'-1)..n_\infty'\rangle = \hat{b}_i^\dagger\hat{b}_k|n_1'..n_i'..n_k'..n_\infty'\rangle$$

e quindi il termine cinetico si potrà riscrivere come segue:

$$\begin{aligned}\hat{T}|\Psi(t)\rangle &= \sum_{n'_1..n'_\infty} \sum_{ik} \langle i|T|k\rangle \hat{b}_i^\dagger \hat{b}_k f(n'_1..n'_i..n'_k..n'_\infty, t)|n'_1..n'_i..n'_k..n'_\infty\rangle \\ &= \sum_{ik} \langle i|T|k\rangle \hat{b}_i^\dagger \hat{b}_k |\Psi(t)\rangle\end{aligned}$$

Osserviamo che

1. Per $n_i = 0 \Rightarrow n'_i = -1$ ma questo termine non contribuisce alla sommatoria e quindi lo si può omettere.
2. Il termine $n'_k = 0$ viene a mancare, ma lo si può aggiungere in quanto non contribuisce alla sommatoria.
3. Per $i = k$ si ottiene proprio n_i come ha da essere.
4. $n_i = N$ implica $n'_i = N - 1$. Quindi mancherebbe alla sommatoria il termine $n'_i = N$ ma lo si puó aggiungere impunemente perchè il vincolo $\sum_{i=1}^{\infty} n'_i = \sum_{i=1}^{\infty} n_i = N$ comporta $n'_k = 0$
5. $n_k = N$ implica $n'_k = N + 1$, ma allora (di nuovo dal vincolo) $n'_i = -1$ e dunque questo termine può essere tolto dalla sommatoria in quanto non contribuisce.

In conclusione per N bosoni identici l'equazione di Schrödinger si può effettivamente scrivere nella forma (1.27),

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t}|\Psi(t)\rangle = \hat{H}|\Psi(t)\rangle$$

purchè l'operatore Hamiltoniano (di seconda quantizzazione) abbia la struttura seguente:[2]

$$\hat{H} = \sum_{ik} \langle i|T|k\rangle\, \hat{b}_i^\dagger \hat{b}_k + \frac{1}{2} \sum_{ijkl} \langle ij|V|kl\rangle\, \hat{b}_i^\dagger \hat{b}_j^\dagger \hat{b}_l \hat{b}_k \tag{1.28}$$

e **gli stati in seconda quantizzazione** si scrivano:

$$|\Psi(t)\rangle = \sum_{n_1..n_\infty=0} f(n_1..n_\infty, t)|n_1..n_\infty\rangle \quad \text{qui le variabili sono i numeri di occupazione} \tag{1.29}$$

[2] Val la pena di notare che l'hermiticità della (1.28) è garantita dal fatto che gli indici che etichettano sia gli stati di singola particella sia gli operatori $b(b^\dagger)$ sono sommati

Ricordiamo che, viceversa, gli stati in prima quantizzazione si scrivono:

$$\Psi(x_1..x_N t) = \sum_{n_1..n_\infty=0} f(n_1..n_\infty, t)\phi_{n_1..n_\infty}(x_1..x_N) \quad \text{qui le variabili sono le coordinate.}$$

Considerando $|n_1 \dots n_\infty\rangle$ come un vettore astratto, si ottiene la funzione d'onda $\phi_{n_1 \dots n_\infty}(x_1 \dots x_N)$ proiettando tale vettore nello spazio delle coordinate:

$$\phi_{n_1 \dots n_\infty}(x_1 \dots x_N) = \langle x_1 \dots x_N | n_1 \dots n_\infty \rangle .$$

La **simmetria** rispetto allo scambio di due particelle qualsiasi è contenuta, in I^a quantizzazione, nella totale simmetria della $\phi_{n_1 \dots n_\infty}(x_1 \dots x_N)$, in II^a quantizzazione, nell'algebra degli operatori $\hat{b}^\dagger$ e $\hat{b}$. Infatti, introducendo il concetto di vuoto, uno stato può essere espresso nel seguente modo:

$$\begin{aligned} |n_1..n_\infty\rangle &= \frac{1}{\sqrt{n_1!}}\left(\hat{b}_1^\dagger\right)^{n_1} \frac{1}{\sqrt{n_2!}}\left(\hat{b}_2^\dagger\right)^{n_2} \cdots \frac{1}{\sqrt{n_\infty!}}\left(\hat{b}_\infty^\dagger\right)^{n_\infty} |0_1 0_2 .. 0_\infty\rangle \\ &= \prod_{i=1}^{\infty} \frac{\left(\hat{b}_i^\dagger\right)^{n_i}}{\sqrt{n_i!}} |0_1 0_2 \dots 0_\infty\rangle \end{aligned} \tag{1.30}$$

che ha palesemente le corrette proprietà di simmetria. Si osservi che i fattori a denominatore compensano le radici dei fattoriali generate dall'azione degli operatori $\left(\hat{b}_i^\dagger\right)^{n_i}$ sul vuoto.

1.6 Bosoni in seconda quantizzazione

Nella sezione precedente si sono introdotti due operatori, l'uno aggiunto dell'altro, definiti dalla loro azione sui vettori di stato:

$$\begin{aligned} \hat{b}_k^\dagger |n_1 \dots n_k \dots n_\infty\rangle &= \sqrt{n_k+1}\, |n_1 \dots (n_k+1) \dots n_\infty\rangle \\ \hat{b}_k |n_1 \dots n_k \dots n_\infty\rangle &= \sqrt{n_k}\, |n_1 \dots (n_k-1) \dots n_\infty\rangle \end{aligned}$$

dove l'n_k fuori dai kets indica il numero di occupazione del $k^{\underline{mo}}$ stato di particella singola. Si deduce allora facilmente che

$$\begin{aligned} \hat{b}_k \hat{b}_k^\dagger\, |n_k\rangle &= \sqrt{n_k+1}\; \hat{b}_k\, |n_k+1\rangle = (n_k+1)\, |n_k\rangle \\ \hat{b}_k^\dagger \hat{b}_k\, |n_k\rangle &= \sqrt{n_k}\; \hat{b}_k^\dagger\, |n_k-1\rangle = n_k\, |n_k\rangle \end{aligned}$$

da cui, sottraendo membro a membro, discende

$$\left[\hat{b}_k, \hat{b}_{k'}^\dagger\right] = \delta_{kk'} \tag{1.31}$$

e analogamente si trova

$$\left[\hat{b}_k, \hat{b}_{k'}\right] = \left[\hat{b}_k^\dagger, \hat{b}_{k'}^\dagger\right] = 0\,. \tag{1.32}$$

Abbiamo cosí riottenuto, consistentemente, l'algebra degli operatori $\hat{b}_k$ e $\hat{b}_l^\dagger$, che si era postulata nel paragrafo precedente.

Si consideri ora l'**operatore numero di particelle nello stato** k

$$\hat{n}_k = \hat{b}_k^\dagger \hat{b}_k \tag{1.33}$$

Esso gode delle seguenti proprietà:

1. è hermitiano
2. $|n_1 \dots n_k \dots n_\infty\rangle$ sono i suoi autostati
3. n_k sono i suoi autovalori, che sono numeri reali poiché $\hat{n}_k$ è hermitiano. **Essi sono anche positivi**, infatti

$$\begin{aligned} n_k &= \langle n_k|\hat{b}_k^\dagger \hat{b}_k|n_k\rangle = \sum_{n_i} \langle n_k|\hat{b}_k^\dagger|n_i\rangle\langle n_i|\hat{b}_k|n_k\rangle \\ &= \sum_{n_i} |\langle n_i|\hat{b}_k|n_k\rangle|^2 = \sum_{n_i} |\langle n_k|\hat{b}_k^\dagger|n_i\rangle|^2 \geq 0 \end{aligned} \tag{1.34}$$

Le regole di commutazione dell'operatore numero si otterranno dai commutatori fondamentali (1.31) e (1.32) come segue:

$$\left[\hat{n}_k, \hat{b}_k\right] = \left[\hat{b}_k^\dagger \hat{b}_k, \hat{b}_k\right] = \hat{b}_k^\dagger \left[\hat{b}_k, \hat{b}_k\right] + \left[\hat{b}_k^\dagger, \hat{b}_k\right] \hat{b}_k = -\hat{b}_k$$

$$\left[\hat{n}_k, \hat{b}_k^\dagger\right] = \left[\hat{b}_k^\dagger \hat{b}_k, \hat{b}_k^\dagger\right] = \hat{b}_k^\dagger \left[\hat{b}_k, \hat{b}_k^\dagger\right] + \left[\hat{b}_k^\dagger, \hat{b}_k^\dagger\right] \hat{b}_k = \hat{b}_k^\dagger$$

Pertanto:

$$\left[\hat{n}_k, \hat{b}_k\right] = -\hat{b}_k \qquad \left[\hat{n}_k, \hat{b}_k^\dagger\right] = \hat{b}_k^\dagger \tag{1.35}$$

Dalle regole di commutazione (1.35) segue che

1^o) se $|n_k\rangle$ è autostato di $\hat{n}_k$ appartenente all'autovalore n_k, cioè se

$$\hat{n}_k|n_k\rangle = n_k|n_k\rangle$$

allora

$$\hat{b}_k^\dagger \hat{b}_k \left(\hat{b}_k|n_k\rangle\right) = (n_k - 1)\left(\hat{b}_k|n_k\rangle\right) \tag{1.36}$$

ossia $\hat{b}_k|n_k\rangle$ è ancora un autostato dell'operatore numero $\hat{n}_k$, ma con autovalore ridotto di un'unità.

Applicazioni ripetute dell'operatore $\hat{b}_k$ a qualunque autostato di $\hat{n}_k$ devono infine dare zero, altrimenti la (1.36) condurrebbe ad un numero di occupazione minore di zero, mentre sappiamo che gli autovalori di $\hat{n}_k$ devono essere ≥ 0.

2^o) se $|n_k\rangle$ è autostato di $\hat{n}_k$ appartenente all'autovalore n_k, allora

$$\hat{b}_k^\dagger \hat{b}_k \left(\hat{b}_k^\dagger |n_k\rangle\right) = (n_k + 1)\left(\hat{b}_k^\dagger |n_k\rangle\right) \tag{1.37}$$

quindi ripetute applicazioni di $\hat{b}_k^\dagger$ aumentano il numero di occupazione di un dato livello. Scriveremo allora:

$$\hat{b}_k^\dagger |n_k\rangle = C_k |n_k + 1\rangle \tag{1.38}$$

dove $|n_k\rangle$ si suppone normalizzato ($\langle n_k|n_k\rangle = 1$) e C_k va definito in modo che anche $|n_k + 1\rangle$ sia normalizzato a 1. Imponiamo quindi:

$$\begin{aligned}\langle n_k + 1|n_k + 1\rangle = 1 = \frac{1}{|C_k|^2}\langle n_k|\hat{b}_k \hat{b}_k^\dagger|n_k\rangle = \\ = \frac{1}{|C_k|^2}\left\{\langle n_k|n_k\rangle + \langle n_k|\hat{b}_k^\dagger \hat{b}_k|n_k\rangle\right\} = \frac{1}{|C_k|^2}(1 + n_k) = 1\end{aligned}$$

Da qui segue che $C_k = \sqrt{1 + n_k}$ e $\hat{b}_k^\dagger|n_k\rangle = \sqrt{n_k + 1}|n_k + 1\rangle$, come si è già scritto in formule precedenti.

3^o) gli operatori $\hat{n}_k$, $\hat{n}'_k$ commutano tra loro: $[\hat{n}_k, \hat{n}_{k'}] = 0$ (cosa che, tra l'altro, giustifica la caratterizzazione dei vettori di stato mediante i diversi numeri di occupazione).
Mostriamo ora che dalla

$$\hat{b}_k^\dagger |n_1 \ldots n_k \ldots n_\infty\rangle = \sqrt{n_k + 1}|n_1 \ldots (n_k + 1) \ldots n_\infty\rangle$$

discende

$$\hat{b}_k |n_1 \ldots n_k \ldots n_\infty\rangle = \sqrt{n_k}|n_1 \ldots (n_k - 1) \ldots n_\infty\rangle$$

Infatti dalla proprietà di chiusura degli stati,

$$1 = \sum_{n'_1 n'_2 \ldots n'_\infty} |n'_1 n'_2 \ldots n'_k \ldots\rangle\langle n'_1 n'_2 \ldots n'_k \ldots|\,,$$

segue che possiamo scrivere

$$
\begin{aligned}
&\hat{b}_k|n_1 \dots n_k \dots\rangle = 1 \cdot \hat{b}_k|n_1 \dots n_k \dots\rangle \\
&= \sum_{n'_1 \dots n'_\infty} |n'_1 \dots n'_k \dots\rangle\langle n'_1 \dots n'_k \dots |\hat{b}_k|n_1 \dots n_k \dots\rangle \\
&= \sum_{n'_1 \dots n'_\infty} |n'_1 \dots n'_k \dots\rangle \left[\langle n_1 \dots n_k \dots |\hat{b}_k^\dagger|n'_1 \dots n'_k \dots\rangle\right]^* \\
&= \sum_{n'_1 .. n'_\infty} |n'_1 .. n'_k ..\rangle \sqrt{n'_k+1}\delta_{n'_1 n_1} .. \delta_{n'_k+1, n_k} = \sqrt{n_k}|n_1 .. (n_k-1) ..\rangle
\end{aligned}
$$

Si noti che nella dimostrazione precedente si è sfruttata la proprietà degli autostati del numero di occupazione di essere il prodotto diretto degli autostati dell'operatore numero per ciascun modo.

Rappresentazione matriciale degli operatori $\hat{b_k}$ e $\hat{b}_k^\dagger$.

Si ha

$$
\begin{aligned}
&\langle n_k|\hat{b}_{k'}|n_{k'}\rangle = \\
&= \sqrt{n_{k'}}\,\langle n_k|n_{k'}-1\rangle \\
&= \sqrt{n_{k'}}\,\delta_{n_k, n_{k'}-1}
\end{aligned}
\quad = \quad
\begin{pmatrix}
0 & \sqrt{1} & 0 & 0 & 0 & \dots \\
0 & 0 & \sqrt{2} & 0 & 0 & \dots \\
0 & 0 & 0 & \sqrt{3} & 0 & \dots \\
0 & 0 & 0 & 0 & \sqrt{4}\dots & \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \sqrt{5}
\end{pmatrix}
$$

dove n_k è l'indice di riga e $n_{k'}$ l'indice di colonna, interi e variabili da 0 a N. Analogamente:

$$
\begin{aligned}
&\langle n_k|\hat{b}_{k'}^\dagger|n_{k'}\rangle = \\
&= \sqrt{n_{k'}+1}\,\langle n_k|n_{k'}+1\rangle \\
&= \sqrt{n_{k'}+1}\,\delta_{n_k, n_{k'}+1}
\end{aligned}
\quad = \quad
\begin{pmatrix}
0 & 0 & 0 & 0 & \dots \\
\sqrt{1} & 0 & 0 & 0 & \dots \\
0 & \sqrt{2} & 0 & 0 & \dots \\
0 & 0 & \sqrt{3} & 0\dots & \\
0 & 0 & 0 & \sqrt{4} & \dots
\end{pmatrix}
$$

sempre con n_k indice di riga e $n_{k'}$ indice di colonna.

Vogliamo ora dare un esempio di come si scrivono le funzioni d'onda e i vettori di base bosonici nel caso di due particelle ($N = 2$) e due livelli ($\mathcal{N} = 2$):

$$
\begin{array}{llll}
 & n_1 = 2\ ,\ n_2 = 0 & n_1 = 1\ ,\ n_2 = 1 & n_1 = 0\ ,\ n_2 = 2 \\
\alpha_2 & \text{———————} & \text{———}\otimes\text{———} & \text{——}\otimes\text{—}\otimes\text{——} \\
\alpha_1 & \text{——}\otimes\text{—}\otimes\text{——} & \text{———}\otimes\text{———} & \text{———————} \\
 & \phi_{20}(x_1, x_2) & \phi_{11}(x_1, x_2) & \phi_{02}(x_1, x_2)
\end{array}
$$

Prima quantizzazione

$$\phi_{20}(x_1, x_2) = \psi_{\alpha_1}(x_1)\psi_{\alpha_1}(x_2)$$

$$\phi_{11}(x_1, x_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left\{ \underbrace{\psi_{\alpha_1}(x_1)\psi_{\alpha_2}(x_2) + \psi_{\alpha_1}(x_2)\psi_{\alpha_2}(x_1)}_{\text{notare il permanente}} \right\}$$

$$\phi_{02}(x_1, x_2) = \psi_{\alpha_2}(x_1)\psi_{\alpha_2}(x_2)$$

Seconda quantizzazione (usando gli operatori di creazione)

$$\begin{aligned}
\phi_{20}(x_1, x_2) \Rightarrow |2, 0\rangle \quad &= \quad \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\hat{b}_1^\dagger\right)^2 |0, 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \hat{b}_1^\dagger \hat{b}_1^\dagger |0, 0\rangle \\
&= \quad \frac{1}{\sqrt{2}} \hat{b}_1^\dagger |1, 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \sqrt{2} |2, 0\rangle = |2, 0\rangle
\end{aligned}$$

$$\phi_{11}(x_1, x_2) \Rightarrow |1, 1\rangle = \hat{b}_1^\dagger \hat{b}_2^\dagger |0, 0\rangle = \hat{b}_1^\dagger |0, 1\rangle = |1, 1\rangle$$

$$\phi_{02}(x_1, x_2) \Rightarrow |0, 2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\hat{b}_2^\dagger\right)^2 |0, 0\rangle = |0, 2\rangle$$

1.7 Fermioni

La funzione d'onda di un insieme di fermioni identici è totalmente antisimmetrica. Cosí pure lo sono i coefficienti dello sviluppo

$$C(\ldots \alpha_i \ldots \alpha_j \ldots t) = -C(\ldots \alpha_j \ldots \alpha_i \ldots t)\,. \tag{1.39}$$

L'antisimmetria dei coefficienti C nello scambio dei numeri quantici di due stati di particella singola qualunque implica che tutte le α_i *devono essere diverse* altrimenti il C corrispondente si annulla. Ne segue che i numeri di occupazione n_i o sono zero o sono 1: è il **principio di Pauli**.

I coefficienti che hanno gli stessi stati occupati (ciascuno una volta sola) sono uguali tra di loro a meno eventualmente di un segno a seconda che si ottengano gli uni dagli altri per un numero pari o dispari di scambi fra coppie α_i.

Conviene allora scegliere un coefficiente di riferimento C in cui gli α_i siano stati ordinati in ordine, per es. , crescente:

$$\bar{C}(n_1 n_2 \ldots n_\infty t) \equiv C(\alpha_1 \ldots \alpha_i < \alpha_j < \alpha_k \ldots \alpha_N t)\ .$$

Con lo stesso procedimento usato per i bosoni possiamo allora sviluppare la funzione d'onda di un sistema, costituito da N fermioni identici che possono disporsi su infiniti livelli di particella singola, come segue:

$$\begin{aligned}\Psi(x_1 \dots x_N t) &= \sum_{\alpha_1 \dots \alpha_N} C(\alpha_1 \dots \alpha_N t)\psi_{\alpha_1}(x_1)\dots\psi_{\alpha_N}(x_N)\\ &= \sum_{n_1..n_\infty} \bar{C}(n_1..n_\infty t)\sqrt{N!}\frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_{P[n_1..n_\infty]} (-1)^P \psi_{\alpha_1}(x_1)..\psi_{\alpha_N}(x_N)\\ &= \sum_{n_1 \dots n_\infty} f(n_1 \dots n_\infty t)\phi_{n_1 \dots n_\infty}(x_1 \dots x_N)\end{aligned}$$

dove ora $f(n_1 \dots n_\infty t) = \sqrt{N!}\,\bar{C}(n_1 \dots n_\infty t)$ essendo per tutti gli i $n_i! = 1$ sia che $n_i = 1$ che $n_i = 0$ e dove la $\phi_{n_1 \dots n_\infty}(x_1 \dots x_N)$ *deve essere una combinazione antisimmetrica di prodotti di funzioni d'onda di particella singola* e quindi tale da annullarsi ogni qualvolta fra gli stati ψ_α che contiene ve ne siano due uguali (ciò infatti equivale ad avere due particelle nello stesso stato). Pertanto sarà:

$$\phi_{n_1..n_\infty}(x_1..x_N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} \psi_{\alpha_1}(x_1) & \psi_{\alpha_1}(x_2) & \dots & \psi_{\alpha_1}(x_N) \\ \psi_{\alpha_2}(x_1) & \psi_{\alpha_2}(x_2) & \dots & \psi_{\alpha_2}(x_N) \\ .. & \dots & \dots & \dots \\ \psi_{\alpha_N}(x_1) & \psi_{\alpha_N}(x_2) & \dots & \psi_{\alpha_N}(x_N) \end{vmatrix} \tag{1.40}$$

Queste funzioni d'onda formano un insieme completo di stati di N fermioni, indipendenti dal tempo, ortonormali e antisimmetrici e vengono dette **determinanti di Slater**. Esse costituiscono gli appropriati stati di base per sviluppare una funzione d'onda a molticorpi fermionica. Ciascuna di esse contiene ovviamente $N!$ termini (sviluppo di un determinante $N \times N$).

Nello spazio astratto dei numeri di occupazione lo sviluppo di uno stato di N fermioni sarà (come per i bosoni):

$$|\Psi(t)\rangle = \sum_{n_i=0}^{1} f(n_1 \dots n_\infty, t)\,|n_1 \dots n_\infty\rangle \tag{1.41}$$

Osserviamo che se i livelli di particella singola su cui sistemare gli N fermioni, anziché essere infiniti, fossero in numero finito ($\mathcal{N}$), allora lo sviluppo di $|\Psi(t)\rangle$ sarebbe *finito* e conterrebbe

$$\frac{\mathcal{N}!}{N!(\mathcal{N}-N)!} = \begin{pmatrix} \mathcal{N} \\ N \end{pmatrix}$$

termini.

Ora l'antisimmetria globale della funzione d'onda deve essere trasferita negli operatori di creazione e distruzione che operano nello spazio astratto dei numeri di occupazione. A tale scopo introduciamo due operatori *time-independent* (l' uno hermitiano coniugato dell' altro) $\hat{a}_k^\dagger$ e $\hat{a}_k$, che chiamiamo di *creazione* e *distruzione* di un fermione nello stato α_k. Essi obbediscono all'algebra:

$$\left\{\hat{a}_k, \hat{a}_l^\dagger\right\} = \delta_{kl}\,, \qquad \{\hat{a}_k, \hat{a}_l\} = \left\{\hat{a}_k^\dagger, \hat{a}_l^\dagger\right\} = 0 \tag{1.42}$$

Da tali parentesi di anticommutazione discendono le proprietà seguenti:

1. $(\hat{a}_k^\dagger)^2 = \hat{a}_k^2 = 0$ quindi $\hat{a}_k^\dagger \hat{a}_k^\dagger |n_k\rangle = \hat{a}_k \hat{a}_k |n_k\rangle = 0$; tali relazioni esprimono il principio di Pauli (operatori nilpotenti)

2. $(\hat{a}_k^\dagger \hat{a}_k)^2 = \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_k \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_k = \hat{a}_k^\dagger (1 - \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_k) \hat{a}_k = \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_k$ ovvero, introducendo l'operatore hermitiano $\hat{n}_k = \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_k$,

   $$\hat{n}_k^2 = \hat{n}_k$$

   che si può anche scrivere come:

   $$\hat{n}_k(1 - \hat{n}_k) = 0$$

   Applicando tale relazione ad autostati di $\hat{n}_k$, segue che gli autovalori dell'operatore "numero di particelle" nello stato di particella singola α_k, i.e. n_k, sono 0 oppure 1 (operatore idempotente).

Vediamo ora come agiscono tali operatori sugli stati. Se $|0\rangle = |0_1, 0_2 \ldots 0_\infty\rangle$ è il **vuoto** (assenza di particelle) definiamo anche qui, come nel caso bosonico, lo stato con numero totale di particelle N (fissato):

$$|n_1 n_2 \ldots n_\infty\rangle = (\hat{a}_1^\dagger)^{n_1} (\hat{a}_2^\dagger)^{n_2} \ldots (\hat{a}_\infty^\dagger)^{n_\infty} |0\rangle = \prod_{i=1}^{\infty} (\hat{a}_i^\dagger)^{n_i} |0\rangle \tag{1.43}$$

Applichiamo ora l'operatore di distruzione $\hat{a}_k$ ad un generico stato. Dovremo allora considerare due casi:

a) $n_k = 1$ (lo stato α_k è occupato da un fermione)

$$\begin{aligned}
\hat{a}_k |n_1 n_2 .. n_k .. n_\infty\rangle &= (-1)^{S_k} (\hat{a}_1^\dagger)^{n_1} (\hat{a}_2^\dagger)^{n_2} .. \hat{a}_k \hat{a}_k^\dagger .. (\hat{a}_\infty^\dagger)^{n_\infty} |0\rangle = \\
&= (-1)^{S_k} (\hat{a}_1^\dagger)^{n_1} (\hat{a}_2^\dagger)^{n_2} \ldots (1 - \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_k) \ldots (\hat{a}_\infty^\dagger)^{n_\infty} |0\rangle = \\
&= (-1)^{S_k} |n_1 n_2 \ldots (n_k - 1) \ldots n_\infty\rangle
\end{aligned}$$

essendo $S_k = n_1 + n_2 + \ldots + n_{k-1}$.

b) $n_k = 0$ (lo stato α_k è vuoto); in questo caso chiaramente

$$\hat{a}_k | \ldots n_k \ldots \rangle = 0$$

Pertanto in forma compatta scriveremo

$$\hat{a}_k | \ldots n_k \ldots \rangle = (-1)^{S_k} \delta_{n_k,1} \sqrt{n_k} | \ldots (n_k - 1) \ldots \rangle \,. \tag{1.44}$$

In modo del tutto analogo si prova che

$$\hat{a}_k^\dagger | \ldots n_k \ldots \rangle = (-1)^{S_k} \delta_{n_k,0} \sqrt{n_k + 1} | \ldots (n_k + 1) \ldots \rangle \tag{1.45}$$

Combinando questi due risultati si ottiene inoltre

$$\begin{aligned} \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_k | n_1 \ldots n_k \ldots n_\infty \rangle &= \delta_{n_k,1} (-1)^{S_k} \sqrt{n_k} \, \hat{a}_k^\dagger \, | n_1 \ldots (n_k - 1) \ldots n_\infty \rangle \\ &= \delta_{n_k,1} (-1)^{2S_k} \sqrt{n_k} \sqrt{n_k} \, \delta_{n_k-1,0} \, | n_1 \ldots n_k \ldots n_\infty \rangle \end{aligned}$$

ossia

$$\hat{n}_k | n_1 \ldots n_k \ldots n_\infty \rangle = n_k | n_1 \ldots n_k \ldots n_\infty \rangle \tag{1.46}$$

dove $\hat{n}_k = \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_k$.

Si noti che l'operatore $\hat{n}_k$ **non** introduce alcuna fase extra. Inoltre operatori numero relativi a modi (stati) diversi commutano tra di loro:

$$[\hat{n}_k, \hat{n}_l] = 0 \,.$$

A posteriori verifichiamo dunque che la definizione di stato

$$| n_1 \ldots n_k \ldots n_\infty \rangle = (\hat{a}_1^\dagger)^{n_1} (\hat{a}_2^\dagger)^{n_2} \ldots (\hat{a}_{n_\infty}^\dagger)^{n_{n_\infty}} \, | 0 \rangle$$

è consistente.

1.8 Hamiltoniana fermionica in seconda quantizzazione

Riscriviamo l'equazione (1.5) per i coefficienti $C(\alpha_1 \ldots \alpha_N t)$ considerando solo il termine cinetico e utilizzando la notazione di Dirac

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} C(\alpha_1 .. \alpha_k .. \alpha_N, t) = \sum_{k=1}^{N} \sum_{\alpha_i} \langle \alpha_k | T | \alpha_i \rangle C(\alpha_1 .. \alpha_{k-1} \alpha_i \alpha_{k+1} .. \alpha_N, t) \tag{1.47}$$

dove il C a primo membro contiene gli argomenti nell'ordine *canonico*. A secondo membro dovremo invece considerare tre casi:

i) se $i < k$ la fase per riordinare gli indici nel coefficiente a secondo membro è $(-1)^{n_{i+1}+n_{i+2}+\ldots+n_{k-1}}$

ii) se $i > k$ tale fase sarà $(-1)^{n_{k+1}+n_{k+2}+\ldots+n_{i-1}}$

iii) infine se $i = k$ non c'è alcuna fase.

Allora, limitatamente al termine cinetico,[3] il secondo membro dell'equazione per i coefficienti diventa

$$\begin{aligned}
&\sum_{k=1}^{N}\left\{\sum_{i<k}\langle\alpha_k|T|\alpha_i\rangle(-1)^{n_{i+1}+n_{i+2}+..+n_{k-1}}C(\alpha_1..\alpha_i..\alpha_{k-1}\alpha_{k+1}..\alpha_N,t)+\right.\\
&+\sum_{i>k}\langle\alpha_k|T|\alpha_i\rangle(-1)^{n_{k+1}+n_{k+2}+..+n_{i-1}}C(\alpha_1..\alpha_{k-1}\alpha_{k+1}..\alpha_i..\alpha_N,t)+\\
&\left.+\langle\alpha_k|T|\alpha_k\rangle C(\alpha_1..\alpha_k..\alpha_N,t)\right\}
\end{aligned}$$

e trasformando la somma sulle particelle in somma sugli stati (nonchè introducendo i coefficienti $\bar{C}$):

$$\begin{aligned}
&i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\bar{C}(n_1..n_i..n_k..n_\infty,t)=\\
&=\sum_{i,k(i<k)}n_k\langle k|T|i\rangle(-1)^{n_{i+1}+n_{i+2}+\ldots+n_{k-1}}\\
&\qquad\times\bar{C}(n_1\ldots(n_i+1)\ldots(n_k-1)\ldots n_\infty,t)+\\
&+\sum_{i,k(i>k)}n_k\langle k|T|i\rangle(-1)^{n_{k+1}+n_{k+2}+\ldots+n_{i-1}}\\
&\qquad\times\bar{C}(n_1\ldots(n_k-1)\ldots(n_i+1)\ldots n_\infty,t)+\\
&+\sum_k n_k\langle k|T|k\rangle\bar{C}(n_1\ldots n_k\ldots n_\infty,t)
\end{aligned}$$

Le equazioni differenziali per i coefficienti $f(n_1\ldots n_\infty,t)$ saranno in conseguenza

$$\begin{aligned}
&i\hbar\frac{\partial}{\partial t}f(n_1..n_i..n_k..n_\infty,t)=\\
&=\sum_{i,k(i<k)}\langle k|T|i\rangle\sqrt{n_k(n_i+1)}(-1)^{n_{i+1}+n_{i+2}+\ldots+n_{k-1}}
\end{aligned}$$

[3] Si noti che il termine potenziale conterrebbe, nel caso fermionico, molti più termini dei 15 individuati per il caso bosonico. Per questa ragione si presenta qui la trasformazione esplicita solo del termine cinetico.

$$
\begin{aligned}
&\times f(n_1 \ldots (n_i+1) \ldots (n_k-1) \ldots n_\infty, t) + \\
&+ \sum_{i,k(i>k)} \langle k|T|i\rangle \sqrt{n_k(n_i+1)}(-1)^{n_{k+1}+n_{k+2}+\ldots+n_{i-1}} \\
&\times f(n_1 \ldots (n_k-1) \ldots (n_i+1) \ldots n_\infty, t) + \\
&+ \sum_k \langle k|T|k\rangle \, n_k f(n_1 \ldots n_k \ldots n_\infty, t) \\
&\qquad + \text{termine potenziale}
\end{aligned}
$$

dove, nel sostituire i $\bar{C}$ con gli f, si è tenuto conto formalmente anche degli $n_i!$ sotto radice (peraltro inessenziali, dato che valgono sempre 1), che possono differire nei coefficienti f a primo e secondo membro dell'equazione precedente.

Adesso, inserendo lo sviluppo di seconda quantizzazione (sempre con N arbitrario, ma fissato),

$$
|\Psi(t)\rangle = \sum_{n_1 \ldots n_\infty = 0}^{1} f(n_1 \ldots n_\infty, t) \, |n_1 \ldots n_\infty\rangle \tag{1.48}
$$

nell'equazione di Schrödinger dipendente dal tempo, si ottiene

$$
\begin{aligned}
i\hbar \frac{\partial}{\partial t}|\Psi(t)\rangle = &\sum_{n_1..n_\infty=0}^{1} \Bigg\{ \sum_{i<k} \langle k|T|i\rangle \sqrt{n_k(n_i+1)} \, \delta_{n_i,0}\delta_{n_k,1} \times \\
&\times (-1)^{n_{i+1}+n_{i+2}+..+n_{k-1}} f(n_1..(n_i+1)..(n_k-1)..n_\infty, t) + \\
&+ \sum_{i>k} \langle k|T|i\rangle \sqrt{n_k(n_i+1)}(-1)^{n_{k+1}+n_{k+2}+..+n_{i-1}} \times \\
&\times f(n_1..(n_k-1)..(n_i+1)..n_\infty, t)\delta_{n_i,0}\delta_{n_k,1} + \\
&\quad + \sum_k \langle k|T|k\rangle \, n_k f(n_1..n_k..n_\infty, t) \Bigg\} |n_1..n_\infty\rangle + \\
&\qquad + \text{termine potenziale}
\end{aligned}
$$

Ponendo $n_k - 1 = n'_k$, $n_i + 1 = n'_i$, $n_l = n'_l$ $(l \neq i \vee k)$ nei primi due termini (i.e. non si mappa l'ultimo termine) e *osservando che le fasi non sono toccate dal mapping* si ottiene

$$
\begin{aligned}
&i\hbar \frac{\partial}{\partial t}|\Psi(t)\rangle = \\
&= \sum_{n'_1..n'_\infty=0}^{1} \Bigg\{ \sum_{i<k} \langle k|T|i\rangle \sqrt{(n'_k+1)n'_i} \, (-1)^{n'_{i+1}+n'_{i+2}+..+n'_{k-1}} \\
&\times \delta_{n'_k,0}\delta_{n'_i,1} f(n'_1..n'_i..n'_k..n'_\infty, t)|n'_1..(n'_i-1)..(n'_k+1)..n'_\infty\rangle +
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
&+\sum_{i>k}\langle k|T|i\rangle\sqrt{(n'_k+1)n'_i}\,(-1)^{n'_{k+1}+n'_{k+2}+..+n'_{i-1}}\\
&\times\delta_{n'_k,0}\delta_{n'_i,1}f(n'_1..n'_k..n'_i..n'_\infty,t)|n'_1..(n'_k+1)..(n'_i-1)..n'_\infty\rangle+\\
&\quad\left.+\sum_k\langle k|T|k\rangle n_k f(n_1..n_k..n_\infty,t)|n_1..n_k..n_\infty\rangle\right\}+\\
&\quad+\text{termine potenziale}
\end{aligned}
$$

Si noti che il mapping darebbe luogo ad alcune apparenti incongruenze, che tuttavia non hanno conseguenze. Infatti esso fornisce:

1. $n'_k=-1$ che però si può togliere in quanto non contribuisce,
2. $n'_i=0$ manca, ma si può aggiungere in quanto non contribuisce,
3. il mapping <u>non</u> fornisce $n'_k=1$ che però non contribuisce, e quindi si può aggiungere alla sommatoria.
4. il mapping fornisce $n'_i=2$ che, tramite il vincolo $\sum_{i=1}^{\infty}n_i=\sum_{i=1}^{\infty}n'_i$, implica $n'_k=-1$ e quindi non contribuisce. Questi ultimi due casi, comunque, sono esclusi dalle delta di Kronecker: $\delta_{n'_k,0}$ e $\delta_{n'_i,1}$.

Otterremo pertanto

$$
\begin{aligned}
&i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\Psi(t)\rangle= \qquad (1.49)\\
&=\sum_{n'_1...n'_\infty=0}^{1}\left\{\sum_{i,k(i<k)}\langle k|T|i\rangle\sqrt{(n'_k+1)n'_i}\,(-1)^{S'_k-S'_i-n'_i}\right.\\
&\times\delta_{n'_k,0}\delta_{n'_i,1}f(n'_1..n'_i..n'_k..n'_\infty,t)|n'_1..(n'_i-1)..(n'_k+1)..n'_\infty\rangle+\\
&+\sum_{i,k(i>k)}\langle k|T|i\rangle\sqrt{(n'_k+1)n'_i}\,(-1)^{S'_i-S'_k-n'_k}\\
&\times\delta_{n'_k,0}\delta_{n'_i,1}f(n'_1..n'_k..n'_i..n'_\infty,t)|n'_1..(n'_k+1)..(n'_i-1)..n'_\infty\rangle+\\
&\quad\left.+\sum_k\langle k|T|k\rangle n_k f(n_1\dots n_k\dots n_\infty,t)|n_1\dots n_k\dots n_\infty\rangle\right\}+\\
&\quad+\text{termine potenziale}
\end{aligned}
$$

Ora se $i<k$

$$
\begin{aligned}
&\hat a_k^\dagger\hat a_i|n'_1..n'_i..n'_k..n'_\infty\rangle=(-1)^{S'_i}\delta_{n'_i,1}\sqrt{n'_i}\,\hat a_k^\dagger|n'_1..(n'_i-1)..n'_k..n'_\infty\rangle=\\
&=(-1)^{S'_i}\delta_{n'_i,1}\sqrt{n'_i}(-1)^{S'_k-n'_i}\delta_{n'_k,0}\sqrt{n'_k+1}\,|n'_1..(n'_i-1)..(n'_k+1)..n'_\infty\rangle
\end{aligned}
$$

dove è opportuno sottolineare l'importanza della fase $(-1)^{S'_i+S'_k-n'_i}$.

Se invece $i > k$

$$\hat{a}_k^\dagger \hat{a}_i |n'_1..n'_k..n'_i..n'_\infty\rangle = (-1)^{S'_i}\delta_{n'_i,1}\sqrt{n'_i}\,\hat{a}_k^\dagger|n'_1..n'_k..(n'_i-1)..n'_\infty\rangle =$$
$$= (-1)^{S'_i}\,\delta_{n'_i,1}\sqrt{n'_i}(-1)^{S'_k}\delta_{n'_k,0}\sqrt{n'_k+1}\,|n'_1..(n'_k+1)..(n'_i-1)..n'_\infty\rangle$$

Osserviamo ora che per $i < k$ la fase va già bene com'è, mentre per $i > k$ possiamo scrivere $(-1)^{S'_i+S'_k} = (-1)^{S'_i+S'_k-n'_k}$ poiché in ogni caso $n'_k = 0$.

In definitiva, combinando le fasi sopra discusse con quelle presenti nella (1.49) e ricordando che, per esempio, $(-1)^{2S'_i} = 1$, otteniamo:

$$\begin{aligned}
& i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\Psi(t)\rangle = \qquad (1.50)\\
&= \sum_{n'_1..n'_\infty=0}^{1}\left\{\sum_{i<k}\langle k|T|i\rangle \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_i f(n'_1..n'_i..n'_k..n'_\infty,t)|n'_1..n'_i..n'_k..n'_\infty\rangle + \right.\\
&+ \sum_{i>k}\langle k|T|i\rangle\,\hat{a}_k^\dagger \hat{a}_i f(n'_1..n'_k..n'_i..n'_\infty,t)|n'_1..n'_k..n'_i..n'_\infty\rangle + \\
&+ \left.\sum_{k}\langle k|T|k\rangle \hat{n}_k f(n_1..n_k..n_\infty,t)|n_1..n_k..n_\infty\rangle\right\} = \\
&\quad = \sum_{i,k}\langle k|T|i\rangle \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_i|\Psi(t)\rangle + \text{termine potenziale}
\end{aligned}$$

Analoghi passaggi, ovviamente complicati dalla presenza di quattro, anziché due, stati di particella singola che vengono via via alterati per effetto del potenziale di interazione, consentono di trattare consistentemente anche il termine potenziale, ottenendo cosí l'equazione di Schrödinger dipendente dal tempo per un sistema di fermioni, in II^a quantizzazione:

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\Psi(t)\rangle = \hat{H}|\Psi(t)\rangle$$

ove l'Hamiltoniana di fermioni interagenti in seconda quantizzazione è:

$$\begin{aligned}
\hat{H} &= \sum_{i,k}\langle k|T|i\rangle \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_i + \frac{1}{2}\sum_{ijkl}\langle kl|V|ij\rangle \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_l^\dagger \hat{a}_j \hat{a}_i \\
&= \sum_{i,k}\langle i|T|k\rangle \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_k + \frac{1}{2}\sum_{ijkl}\langle ij|V|kl\rangle \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_l \hat{a}_k\,. \qquad (1.51)
\end{aligned}$$

La seconda espressione è uguale alla prima poiché ovviamente $\hat{H}$ è hermitiano e si può sempre scegliere una rappresentazione nella quale gli elementi di matrice dell'energia cinetica T e del potenziale V sono reali.

Si noti qui la struttura del termine potenziale, nel quale l'ordine con cui compaiono le coppie di operatori di creazione e di distruzione è fondamentale per ottenere risultati corretti: in particolare lo stato $|kl\rangle$ è accompagnato dagli operatori $\hat{a}_l \hat{a}_k$, **in ordine inverso** rispetto allo stato.

Capitolo 2

Campi

Gli operatori di campo sono definiti come combinazioni lineari di operatori di creazione o distruzione di particelle, siano esse bosoni o fermioni, in uno stato definito, “pesati” dalla funzione d'onda di particella singola (stazionaria) relativa allo stato stesso:

$$\hat{\Psi}(\vec{x}) = \sum_k \psi_k(\vec{x})\hat{c}_k \tag{2.1}$$

$$\hat{\Psi}^\dagger(\vec{x}) = \sum_k \psi_k^*(\vec{x})\hat{c}_k^\dagger \tag{2.2}$$

dove la sommatoria corre su di un insieme completo di numeri quantici atti a caratterizzare lo stato di particella ψ_k. Come si vedrà nel seguito, l'azione di un campo consiste nel creare o distruggere una particella in un certo punto $(\vec{x})$ dello spazio, anziche' in un certo stato quantistico.

In descrizione di Schrödinger i campi non dipendono dal tempo. Essi sono comunque operatori nello spazio dei numeri di occupazione, essendo espressi tramite gli operatori di creazione e distruzione.

Inclusione dello spin nel formalismo.

Nel caso di fermioni, è opportuno specificare che l'indice k nella sommatoria denota, per esempio, l'insieme dei numeri quantici $\{\vec{k}, s_z\}$, dove $\vec{k}$ é l' impulso e s_z è la terza componente dello spin.

È tuttavia più conveniente **attribuire** alla funzione d'onda di particella singola due indici $\psi_k(\vec{x})_\alpha$, con $\alpha = \pm\frac{1}{2}$, nel caso dei fermioni con spin $\frac{1}{2}$, mentre k indica tutti gli altri numeri quantici (spaziali) necessari per specificare lo stato.

Lo sviluppo del campo fermionico con indice spinoriale sarà allora

$$\hat{\Psi}_\alpha(\vec{x}) = \sum_k \psi_k(\vec{x})_\alpha \hat{c}_{k\alpha} \tag{2.3}$$

$$\hat{\Psi}^\dagger_\alpha(\vec{x}) = \sum_k \psi^*_k(\vec{x})_\alpha \hat{c}^\dagger_{k\alpha} \tag{2.4}$$

mentre il campo completo (nel senso, per es., che distrugge una particella in $\vec{x}$ con ogni possibile orientazione di spin) sarà

$$\begin{aligned} \hat{\Psi}(\vec{x}) &= \sum_\alpha \hat{\Psi}_\alpha(\vec{x})\eta_\alpha = \hat{\Psi}_+(\vec{x})\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix} + \hat{\Psi}_-(\vec{x})\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}\hat{\Psi}_+(\vec{x})\\ \hat{\Psi}_-(\vec{x})\end{pmatrix} = \\ &= \sum_{k\alpha} \psi_k(\vec{x})_\alpha \eta_\alpha \hat{c}_{k\alpha} \end{aligned}$$

L'**algebra** degli operatori di campo (2.1), (2.2) è la seguente (gli indici α, β di spin si riferiscono solo a fermioni e non sono presenti nel caso di bosoni di spin zero):

$$\begin{aligned} \left[\hat{\Psi}_\alpha(\vec{x}), \hat{\Psi}^\dagger_\beta(\vec{x'})\right]_\mp &= \left[\sum_k \psi_k(\vec{x})_\alpha \hat{c}_{k\alpha}, \sum_{k'} \psi^*_{k'}(\vec{x'})_\beta \hat{c}^\dagger_{k'\beta}\right]_\mp \\ &= \sum_{kk'} \psi_k(\vec{x})_\alpha \psi^*_{k'}(\vec{x'})_\beta \left[\hat{c}_{k\alpha}, \hat{c}^\dagger_{k'\beta}\right]_\mp \\ &= \delta_{\alpha\beta} \sum_{kk'} \delta_{kk'} \psi_k(\vec{x})_\alpha \psi^*_{k'}(\vec{x'})_\beta \end{aligned}$$

ossia

$$\left[\hat{\Psi}_\alpha(\vec{x}), \hat{\Psi}^\dagger_\beta(\vec{x'})\right]_\mp = \delta_{\alpha\beta}\delta(\vec{x} - \vec{x'}) \tag{2.5}$$

e analogamente si prova che

$$\left[\hat{\Psi}_\alpha(\vec{x}), \hat{\Psi}_\beta(\vec{x'})\right]_\mp = \left[\hat{\Psi}^\dagger_\alpha(\vec{x}), \hat{\Psi}^\dagger_\beta(\vec{x'})\right]_\mp = 0\,. \tag{2.6}$$

Nelle equazioni (2.5) e (2.6) il segno $-$ (commutatori) si riferisce ovviamente a bosoni, mentre il segno $+$ (anticommutatori) si riferisce a fermioni. Notiamo inoltre che le funzioni d'onda di singolo fermione *corrispondenti ad una data orientazione dello spin* formano, di per sé, un sistema ONC.

È importante osservare che l'algebra dei campi è stata ottenuta sfruttando la completezza dell'insieme delle funzioni d'onda di particella singola: si comprende pertanto perchè nello sviluppo dei campi gli operatori di creazione e distruzione sono "pesati" dalle funzioni d'onda di particella singola.

Vediamo ora come riscrivere l'**operatore Hamiltoniana** tramite i campi. Trascurando per semplicità lo spin (in modo da fornire una notazione valida sia per campi fermionici che bosonici) avremo:

$$\begin{aligned}\hat{H} &= \sum_{i,k} \langle i|T|k\rangle \hat{c}_i^\dagger \hat{c}_k + \frac{1}{2}\sum_{ijkl} \langle ij|V|kl\rangle \hat{c}_i^\dagger \hat{c}_j^\dagger \hat{c}_l \hat{c}_k \\ &= \int d\vec{x}\hat{\Psi}^\dagger(\vec{x})T(\vec{x})\hat{\Psi}(\vec{x}) + \frac{1}{2}\iint d\vec{x}d\vec{x'}\hat{\Psi}^\dagger(\vec{x})\hat{\Psi}^\dagger(\vec{x'})V(\vec{x},\vec{x'})\hat{\Psi}(\vec{x'})\hat{\Psi}(\vec{x}).\end{aligned} \tag{2.7}$$

Pertanto (in descrizione di Schrödinger) i campi appaiono come operatori che creano (o distruggono) una particella in un determinato punto dello spazio $\vec{x}$.

2.1 Operatori a un corpo in seconda quantizzazione

In analogia con l'operatore energia cinetica, che è un operatore a un corpo, scriveremo come segue l'espressione in seconda quantizzazione di un generico operatore che agisca sullo stato di una sola particella alla volta:

$$\begin{aligned}\hat{J} &= \sum_{rs} \langle r|J|s\rangle \hat{c}_r^\dagger \hat{c}_s = \int d\vec{x} \sum_{rs} \psi_r^*(\vec{x})J(\vec{x})\psi_s(\vec{x})\hat{c}_r^\dagger \hat{c}_s \\ &= \int d\vec{x}\, \hat{\Psi}^\dagger(\vec{x})J(\vec{x})\hat{\Psi}(\vec{x})\,.\end{aligned} \tag{2.8}$$

Come esempio di operatore a un corpo consideriamo l'operatore **densità delle particelle** costituenti un dato sistema a molticorpi (per una fissata proiezione di spin). In I^a quantizzazione (e per particelle puntiformi) esso si scrive:

$$n(\vec{x}) = \sum_{i=1}^{N} \delta(\vec{x} - \vec{x}_i)\,.$$

Infatti, per una sola particella,

$$\int d\vec{x}_1 \psi^*(\vec{x}_1)\delta(\vec{x} - \vec{x}_1)\psi(\vec{x_1}) = |\psi(\vec{x})|^2\,.$$

In seconda quantizzazione si converte la somma sulle particelle in somma sugli stati e quindi avremo

$$\hat{n}_\alpha(\vec{x}) = \sum_{rs} \langle r\beta|n|s\alpha\rangle \hat{c}_{r\beta}^\dagger \hat{c}_{s\alpha} =$$

$$
\begin{aligned}
&= \sum_{rs}\int d\vec{x'}\psi_r^*(\vec{x'})_\beta\chi_\beta^\dagger\delta(\vec{x}-\vec{x'})\psi_s(\vec{x'})_\alpha\chi_\alpha\hat{c}_{r\beta}^\dagger\hat{c}_{s\alpha} = \\
&= \int d\vec{x'}\hat{\Psi}_\beta^\dagger(\vec{x'})\delta_{\alpha\beta}\delta(\vec{x}-\vec{x'})\hat{\Psi}_\alpha(\vec{x'}) = \hat{\Psi}_\alpha^\dagger(\vec{x})\hat{\Psi}_\alpha(\vec{x})
\end{aligned}
$$

ovvero:

$$
\hat{n}_\alpha(\vec{x}) = \delta_{\alpha\beta}\hat{\Psi}_\beta^\dagger(\vec{x})\hat{\Psi}_\alpha(\vec{x}) = \hat{\Psi}_\alpha^\dagger(\vec{x})\hat{\Psi}_\alpha(\vec{x}) \tag{2.9}
$$

Vale la pena osservare che, avendo introdotto nel $\langle bra|$ e nel $|ket\rangle$ le funzioni d'onda di particella singola complete, e cioé la parte spaziale moltiplicata per la parte di spin, nascono spontaneamente i campi con indice spinoriale, eq. (2.3) e (2.4).

Operatore numero totale (di particelle)

$$
\begin{aligned}
\hat{N} &= \int d\vec{x}\sum_\alpha \hat{\Psi}_\alpha^\dagger(\vec{x})\hat{\Psi}_\alpha(\vec{x}) = \\
&= \sum_\alpha\sum_{rs}\int d\vec{x}\psi_r^*(\vec{x})_\alpha\psi_s(\vec{x})_\alpha\hat{c}_{r\alpha}^\dagger\hat{c}_{s\alpha} = \sum_{r\alpha}\hat{c}_{r\alpha}^\dagger\hat{c}_{r\alpha} \equiv \sum_{r\alpha}\hat{n_{r\alpha}}. \qquad (2.10)
\end{aligned}
$$

Ricordiamo che $\hat{c}_{r\alpha}^\dagger\hat{c}_{r\alpha}$ è l'operatore numero relativo allo stato di particella singola $''r''$, con proiezione di spin α.

Notiamo che l'Hamiltoniana $\hat{H}$, sia quando è espressa tramite gli operatori di creazione e distruzione, sia quando è espressa tramite gli operatori di campo [si veda l'eq. (2.7)], <u>non</u> si riferisce ad uno specifico numero di particelle, anche se quest' ultimo è, in genere, fissato poiché

$$
\left[\hat{H},\hat{N}\right] = 0,
$$

come si verifica facilmente dalla (2.10) e quindi N è una costante del moto. Invece, generalmente, $\left[\hat{H},\hat{n_{r\alpha}}\right] \neq 0$.

2.2 Descrizione di Schrödinger

Si richiamano qui di seguito gli elementi principali delle tre descrizioni di uso più comune in meccanica quantistica (Schrödinger, Interazione e Heisenberg) per preparare la strada allo studio dei propagatori.

L'equazione di evoluzione temporale di uno stato in descrizione di Schrödinger, nella quale gli operatori **non** dipendono dal tempo,

$$
i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\Psi_S(t)\rangle = \hat{H}|\Psi_S(t)\rangle \tag{2.11}
$$

ammette la seguente soluzione formale

$$|\Psi_S(t)\rangle = e^{-i\hat{H}(t-t_0)/\hbar}|\Psi_S(t_0)\rangle = \hat{S}|\Psi_S(t_0)\rangle\,.$$

Pertanto l'**operatore di evoluzione temporale** in descrizione di Schrödinger si scriverà:

$$\hat{S} = e^{-i\hat{H}(t-t_0)/\hbar}\,. \tag{2.12}$$

Esso é unitario (purchè H sia hermitiana)

$$\hat{S}^\dagger = \hat{S}^{-1}$$

Osservazioni:

- nella descrizione di Schrödinger, quella piú comune in meccanica quantistica, i vettori di stato dipendono dal tempo, gli operatori no
- ricordiamo che una trasformazione unitaria converte una base ortogonale in un'altra base, ancora ortogonale
- un operatore esponenziale é definito tramite il suo sviluppo formale in serie di potenze.

2.3 Descrizione di interazione

Scrivendo l'Hamiltoniana $\hat{H}$ come somma di una parte "libera" ($\hat{H}_0$) e di una parte "di interazione" ($\hat{H}_1$),

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_1,$$

lo stato in descrizione d'interazione risulta definito come segue:

$$|\Psi_I(t)\rangle = e^{i\frac{\hat{H}_0}{\hbar}t}|\Psi_S(t)\rangle \tag{2.13}$$

da cui, derivando rispetto al tempo, segue

$$\frac{\partial}{\partial t}|\Psi_I(t)\rangle = i\frac{\hat{H}_0}{\hbar}e^{i\frac{\hat{H}_0}{\hbar}t}|\Psi_S(t)\rangle + e^{i\frac{\hat{H}_0}{\hbar}t}\frac{\partial}{\partial t}|\Psi_S(t)\rangle$$

ovvero, tenendo conto della (2.11),

$$\frac{\partial}{\partial t}|\Psi_I(t)\rangle = \frac{i}{\hbar}\hat{H}_0|\Psi_I(t)\rangle - \frac{i}{\hbar}e^{i\frac{\hat{H}_0}{\hbar}t}\hat{H}e^{-i\frac{\hat{H}_0}{\hbar}t}|\Psi_I(t)\rangle$$

Possiamo quindi riscrivere l'equazione di evoluzione temporale per il vettore di stato in descrizione di interazione come segue:

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\Psi_I(t)\rangle = \hat{H}_1(t)|\Psi_I(t)\rangle \tag{2.14}$$

essendo

$$\hat{H}_1(t) = e^{i\frac{\hat{H}_0}{\hbar}t}\hat{H}_1 e^{-i\frac{\hat{H}_0}{\hbar}t} \tag{2.15}$$

Consideriamo ora un elemento di matrice di un generico operatore; imponendo che esso non dipenda dalla descrizione utilizzata per gli stati, ossia che

$$\begin{aligned}\langle\Psi'_S(t)|\hat{O}_S|\Psi_S(t)\rangle &= \langle\Psi'_S(t)|e^{-i\frac{\hat{H}_0}{\hbar}t}e^{i\frac{\hat{H}_0}{\hbar}t}\hat{O}_S e^{-i\frac{\hat{H}_0}{\hbar}t}e^{i\frac{\hat{H}_0}{\hbar}t}|\Psi_S(t)\rangle \\ &= \langle\Psi'_I(t)|\hat{O}_I(t)|\Psi_I(t)\rangle\end{aligned}$$

se ne deduce la relazione tra operatori (generici) in descrizione di Schrödinger e in descrizione di interazione:

$$\hat{O}_I(t) = e^{i\frac{\hat{H}_0}{\hbar}t}\hat{O}_S e^{-i\frac{\hat{H}_0}{\hbar}t}, \tag{2.16}$$

che generalizza la (2.15).

Vediamo ora come evolve temporalmente un operatore in descrizione di interazione. Derivando rispetto al tempo la (2.16) otteniamo:

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\hat{O}_I(t) = i\hbar\frac{i}{\hbar}\left\{\hat{H}_0 e^{i\frac{\hat{H}_0}{\hbar}t}\hat{O}_S e^{-i\frac{\hat{H}_0}{\hbar}t} - e^{i\frac{\hat{H}_0}{\hbar}t}\hat{O}_S e^{-i\frac{\hat{H}_0}{\hbar}t}\hat{H}_0\right\}$$

ossia

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\hat{O}_I(t) = \left[\hat{O}_I(t), \hat{H}_0\right] \tag{2.17}$$

Esempio

Gli operatori in descrizione di interazione dipendono dal tempo. Vediamo di che tipo è questa dipendenza in un esempio concreto. Consideriamo il caso in cui l' Hamiltoniana libera sia diagonale (per esempio, se l' Hamiltoniana libera è puramente cinetica, allora le onde piane diagonalizzano $\hat{H}_0$ in prima quantizzazione):

$$\hat{H}_0 = \sum_{k'}\hbar\omega_{k'}\hat{c}^\dagger_{k'}\hat{c}_{k'}$$

con $\hbar\omega_k = (\hbar\vec{k})^2/2m$. In questo caso si ha

$$\left[\hat{c}_k, \hat{H}_0\right] = \hbar\omega_k\hat{c}_k$$

Infatti ricordiamo che per bosoni vale

$$\left[\hat{b}_k, \hat{b}^\dagger_{k'}\hat{b}_{k'}\right] = \left[\hat{b}_k, \hat{b}^\dagger_{k'}\right]\hat{b}_{k'} + \hat{b}^\dagger_{k'}\left[\hat{b}_k, \hat{b}_{k'}\right] = \delta_{kk'}\hat{b}_{k'}$$

mentre per fermioni

$$\left[\hat{a}_k, \hat{a}^\dagger_{k'}\hat{a}_{k'}\right] = \left\{\hat{a}_k, \hat{a}^\dagger_{k'}\right\}\hat{a}_{k'} - \hat{a}^\dagger_{k'}\left\{\hat{a}_k, \hat{a}_{k'}\right\} = \delta_{kk'}\hat{a}_{k'} \ .$$

Quindi, scrivendo l'equazione del moto (2.17) per un operatore in descrizione di interazione, avremo

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\hat{c}_{k_I}(t) = \left[\hat{c}_{k_I}(t), \hat{H}_0\right] = e^{i\frac{\hat{H}_0}{\hbar}t}\left[\hat{c}_k, \hat{H}_0\right]e^{-i\frac{\hat{H}_0}{\hbar}t} = \hbar\omega_k\hat{c}_{k_I}(t)$$

da cui l'integrazione esplicita fornisce:

$$\hat{c}_{k_I}(t) = \hat{c}_k e^{-i\omega_k t} \quad , \quad \hat{c}^\dagger_{k_I}(t) = \hat{c}^\dagger_k e^{i\omega_k t} \ , \tag{2.18}$$

formule che risolvono il nostro problema.

Per quanto riguarda l'energia potenziale in II^a quantizzazione e in descrizione di interazione, essa si scriverà come segue:

$$\begin{aligned}
\hat{V}_I(t) &= e^{i\frac{\hat{H}_0}{\hbar}t}\hat{V}_S e^{-i\frac{\hat{H}_0}{\hbar}t} \\
&= e^{i\frac{\hat{H}_0}{\hbar}t}\frac{1}{2}\sum_{k_1k_2k_3k_4}\langle k_1k_2|V|k_3k_4\rangle\hat{c}^\dagger_{k_1}\hat{c}^\dagger_{k_2}\hat{c}_{k_4}\hat{c}_{k_3}e^{-i\frac{\hat{H}_0}{\hbar}t} = \\
&= \frac{1}{2}\sum_{k_1k_2k_3k_4}\langle k_1k_2|V|k_3k_4\rangle e^{i\frac{\hat{H}_0}{\hbar}t}\hat{c}^\dagger_{k_1}e^{-i\frac{\hat{H}_0}{\hbar}t}e^{i\frac{\hat{H}_0}{\hbar}t}\hat{c}^\dagger_{k_2}e^{-i\frac{\hat{H}_0}{\hbar}t}\ldots = \\
&= \frac{1}{2}\sum_{k_1k_2k_3k_4}\langle k_1k_2|V|k_3k_4\rangle\hat{c}^\dagger_{k_1I}(t)\hat{c}^\dagger_{k_2I}(t)\hat{c}_{k_4I}(t)\hat{c}_{k_3I}(t)
\end{aligned}$$

2.4 Soluzione delle equazioni del moto in descrizione di interazione

Definiamo l'operatore di *evoluzione temporale* $\hat{U}(t, t_0)$, che, come vedremo, è di importanza centrale in tutta la trattazione seguente. Esso, per definizione, fa evolvere nel tempo uno stato in descrizione di interazione:

$$|\Psi_I(t)\rangle = \hat{U}(t, t_0)|\Psi_I(t_0)\rangle \ . \tag{2.19}$$

Evidentemente dev'essere:

$$\hat{U}(t_0, t_0) = 1$$

Ora, poiché è:

$$|\Psi_I(t)\rangle = e^{i\frac{\hat{H}_0}{\hbar}t}|\Psi_S(t)\rangle = e^{i\frac{\hat{H}_0}{\hbar}t}e^{-i\frac{\hat{H}}{\hbar}(t-t_0)}e^{-i\frac{\hat{H}_0}{\hbar}t_0}|\Psi_I(t_0)\rangle\,,$$

per l'operatore di evoluzione temporale si potrà scrivere l'espressione:

$$\hat{U}(t,t_0) = e^{i\frac{\hat{H}_0}{\hbar}t}e^{-i\frac{\hat{H}}{\hbar}(t-t_0)}e^{-i\frac{\hat{H}_0}{\hbar}t_0}\,. \tag{2.20}$$

Si possono facilmente dimostrare le seguenti proprietà:

1. $$\hat{U}^\dagger(t,t_0)\hat{U}(t,t_0) = 1 = \hat{U}(t,t_0)\hat{U}^\dagger(t,t_0)$$
   pertanto <u>$\hat{U}$ é unitario, ma non hermitiano</u>, infatti:
   $$\hat{U}^\dagger(t,t_0) = \hat{U}^{-1}(t,t_0)$$
2. proprietà gruppale (in realtà si tratta di un semigruppo):
   $$\hat{U}(t_1,t_2)\hat{U}(t_2,t_3) = \hat{U}(t_1,t_3)$$
3. $$\hat{U}(t,t_0)\hat{U}(t_0,t) = 1$$
   da cui
   $$\hat{U}(t_0,t) = \hat{U}^\dagger(t,t_0)$$

Cerchiamo ora un'**equazione integrale per** $\hat{U}(t,t_0)$. In descrizione di interazione, dalle equazioni (2.14) e (2.19) possiamo riscrivere l'equazione di evoluzione di uno stato come segue:

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\hat{U}(t,t_0)|\Psi_I(t_0)\rangle = \hat{H}_1(t)\hat{U}(t,t_0)|\Psi_I(t_0)\rangle \tag{2.21}$$

da cui, dato che lo stato $|\Psi_I(t_0)\rangle$ è del tutto generico, discende l'equazione di evoluzione per l'operatore stesso:

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\hat{U}(t,t_0) = \hat{H}_1(t)\hat{U}(t,t_0) \tag{2.22}$$

Quest'ultima può essere formalmente integrata, ottenendo

$$\hat{U}(t,t_0) - \hat{U}(t_0,t_0) = -\frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t}\hat{H}_1(t')\hat{U}(t',t_0)dt'\,. \tag{2.23}$$

Si ottiene cosí l'equazione integrale desiderata

$$\hat{U}(t,t_0) = 1 - \frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t}\hat{H}_1(t')\hat{U}(t',t_0)dt'\,, \tag{2.24}$$

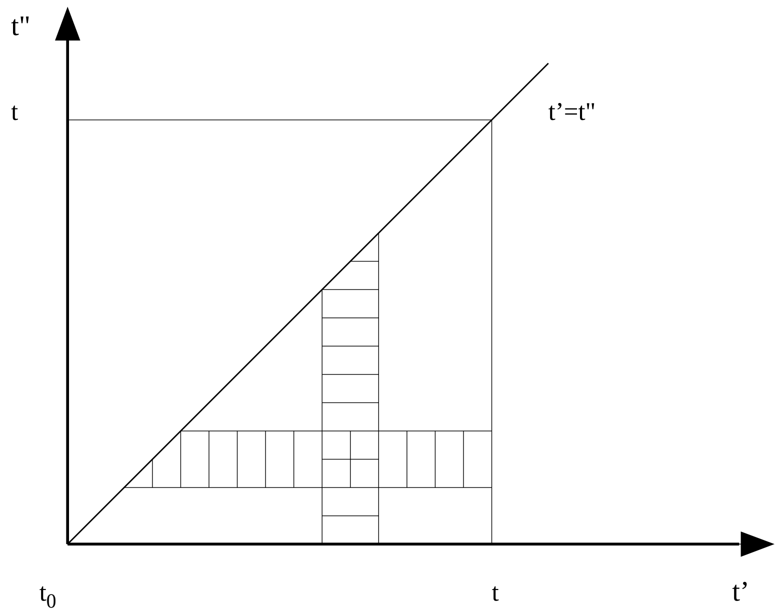


Figura 2.1: Regione di integrazione.

che è un'equazione integrale di tipo Volterra. In essa è massimamente importante l'ordine dei fattori.

Cerchiamone ora una soluzione iterativa. Con procedimento standard si ottiene:

$$\hat{U}(t,t_0)=1+\left(-\frac{i}{\hbar}\right)\int_{t_0}^{t}dt'\hat{H}_1(t')+\left(-\frac{i}{\hbar}\right)^2\int_{t_0}^{t}dt'\hat{H}_1(t')\int_{t_0}^{t'}dt''\hat{H}_1(t'')+.. \quad (2.25)$$

Consideriamo l'ultimo termine, che è integrato,tra l'ascissa e la bisettrice, nel triangolo inferiore della figura 2.1, seguendo le fasce verticali (fino a $t' = t$). Esso si può riscrivere come segue:

$$\int_{t_0}^{t}dt'\int_{t_0}^{t'}dt''\hat{H}_1(t')\hat{H}_1(t'') =$$
$$= \frac{1}{2}\int_{t_0}^{t}dt'\int_{t_0}^{t'}dt''\hat{H}_1(t')\hat{H}_1(t'') + \frac{1}{2}\int_{t_0}^{t}dt''\int_{t''}^{t}dt'\hat{H}_1(t')\hat{H}_1(t'')$$

dove, nel secondo addendo, si è scambiato l'ordine delle integrazioni. Ciò corrisponde a ricoprire lo stesso triangolo di figura 2.1, ma seguendo le fasce orizzontali. Scambiando (solo in questo secondo termine) fra di loro il nome delle variabili sulle quali si integra, si ottiene

$$\frac{1}{2}\int_{t_0}^{t} dt' \int_{t_0}^{t'} dt'' \hat{H}_1(t')\hat{H}_1(t'') + \frac{1}{2}\int_{t_0}^{t} dt' \int_{t'}^{t} dt'' \hat{H}_1(t'')\hat{H}_1(t') =$$
$$= \frac{1}{2}\int_{t_0}^{t} dt' \int_{t_0}^{t} dt'' \left[\hat{H}_1(t')\hat{H}_1(t'')\theta(t'-t'') + \hat{H}_1(t'')\hat{H}_1(t')\theta(t''-t')\right]$$

Quest'ultima espressione suggerisce la necessità di definire il **prodotto cronologicamente ordinato**

$$T\left[\hat{H}_1(t)\hat{H}_1(t')\right] = \hat{H}_1(t)\hat{H}_1(t')\theta(t-t') + \hat{H}_1(t')\hat{H}_1(t)\theta(t'-t)\,, \quad (2.26)$$

che ci permette infine di riscrivere il termine sopra considerato nella forma:

$$\int_{t_0}^{t} dt' \int_{t_0}^{t'} dt'' \hat{H}_1(t')\hat{H}_1(t'') = \frac{1}{2}\int_{t_0}^{t} dt' \int_{t_0}^{t} dt'' T\left[\hat{H}_1(t')\hat{H}_1(t'')\right] .$$

Questa formula può essere facilmente estesa a tutti gli ordini iterativi nella soluzione (2.25) dell'equazione (2.24), ottenendo cosí l'espressione fondamentale

$$\begin{aligned}\hat{U}(t,t_0) &= \sum_{n=0}^{\infty}\left(-\frac{i}{\hbar}\right)^n \frac{1}{n!}\int_{t_0}^{t} dt_1 \ldots \int_{t_0}^{t} dt_n T\left[\hat{H}_1(t_1)\ldots\hat{H}_1(t_n)\right] = \\ &= T\left\{e^{-\frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t} dt' \hat{H}_1(t')}\right\} \qquad (2.27)\end{aligned}$$

Osservazioni importanti

- la conoscenza dell'operatore di evoluzione temporale $\hat{U}(t,t_0)$ equivale ad aver trovato la soluzione dell'equazione del moto per il vettore di stato in descrizione di interazione (purché questo sia noto ad un istante iniziale t_0):

  $$|\Psi_I(t)\rangle = \hat{U}(t,t_0)|\Psi_I(t_0)\rangle$$

- due operatori $\hat{H}_1(t)$ a tempi diversi non commutano. Infatti

  $$\hat{H}_1(t')\hat{H}_1(t'') = e^{i\frac{\hat{H}_0}{\hbar}t'}\hat{H}_1 e^{-i\frac{\hat{H}_0}{\hbar}t'} e^{i\frac{\hat{H}_0}{\hbar}t''}\hat{H}_1 e^{-i\frac{\hat{H}_0}{\hbar}t''}$$

  e, in generale, $\hat{H}_0$ e $\hat{H}_1$ non commutano, rendendo evidente l'affermazione precedente.

- l'integrazione nell'iperspazio a n dimensioni $[t_1, t_2 \ldots t_n]$ si effettua sul simplesso: il volume con minor numero di facce, spigoli e vertici che si può costruire nell'iperspazio dato.

2.5 Descrizione di Heisenberg

La trasformazione unitaria che la definisce è la seguente:

$$|\Psi_H(t)\rangle = e^{i\frac{\hat{H}}{\hbar}t}|\Psi_S(t)\rangle$$

da cui si può facilmente dimostrare che *i vettori di stato in descrizione di Heisenberg non dipendono dal tempo.* Infatti:

$$\begin{aligned}
\frac{\partial}{\partial t}|\Psi_H(t)\rangle &= i\frac{\hat{H}}{\hbar}e^{i\frac{\hat{H}}{\hbar}t}|\Psi_S(t)\rangle + e^{i\frac{\hat{H}}{\hbar}t}\frac{\partial}{\partial t}|\Psi_S(t)\rangle = \\
&= e^{i\frac{\hat{H}}{\hbar}t}\left\{i\frac{\hat{H}}{\hbar}|\Psi_S(t)\rangle + \frac{\partial}{\partial t}|\Psi_S(t)\rangle\right\} = \\
&= \frac{i}{\hbar}e^{i\frac{\hat{H}}{\hbar}t}\left\{\hat{H} - i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\right\}|\Psi_S(t)\rangle = 0
\end{aligned}$$

e pertanto $\frac{\partial}{\partial t}|\Psi_H(t)\rangle = 0$.

Consideriamo ora un elemento di matrice di un generico operatore. Partendo dalla descrizione di Schrödinger effettuiamo la trasformazione inversa sugli stati. Si ottiene:

$$\begin{aligned}
\langle\Psi'_S(t)|\hat{O}_S|\Psi_S(t)\rangle &= \langle\Psi'_H|e^{i\frac{\hat{H}}{\hbar}t}\hat{O}_S e^{-i\frac{\hat{H}}{\hbar}t}|\Psi_H\rangle \\
&= \langle\Psi'_H|\hat{O}_H(t)|\Psi_H\rangle\,. \qquad (2.28)
\end{aligned}$$

Dunque la dipendenza dal tempo viene trasferita agli operatori, che, in descrizione di Heisenberg, sono definiti come segue:

$$\hat{O}_H(t) = e^{i\frac{\hat{H}}{\hbar}t}\hat{O}_S e^{-i\frac{\hat{H}}{\hbar}t}\,. \qquad (2.29)$$

Pertanto gli operatori in descrizione di Heisenberg dipendono dal tempo e la loro equazione di evoluzione temporale è:

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\hat{O}_H(t) = \left[\hat{O}_H(t), \hat{H}\right]\,. \qquad (2.30)$$

Connessione tra descrizione di Heisenberg e di interazione.

Dalle relazioni tra operatori in descrizione di Heisenberg, Schrödinger e di interazione e dalla legge di evoluzione temporale di questi ultimi si possono ottenere le relazioni seguenti:

$$\hat{O}_H(t) = e^{i\frac{\hat{H}}{\hbar}t}e^{-i\frac{\hat{H}_0}{\hbar}t}\hat{O}_I e^{i\frac{\hat{H}_0}{\hbar}t}e^{-i\frac{\hat{H}}{\hbar}t}$$

$$\hat{O}_H(t) = \hat{U}(0,t)\hat{O}_I(t)\hat{U}(t,0) = \hat{U}^\dagger(t,0)\hat{O}_I(t)\hat{U}(t,0)$$

Dunque la trasformazione che fa passare dalla descrizione di interazione a quella di Heisenberg è indotta dall'operatore $\hat{U}^\dagger(t,0)$. Avremo anche:

$$\begin{aligned}
|\Psi_H\rangle \quad &= \hat{U}^\dagger(t,0)|\Psi_I(t)\rangle = \hat{U}(0,t)e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}_0 t}|\Psi_S(t)\rangle \\
&= e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}_0 t}e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}_0 t}|\Psi_S(t)\rangle = e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}|\Psi_S(t)\rangle.
\end{aligned}$$

Ora, se $|\Psi_S(t)\rangle$ è autostato di $\hat{H}$ appartenente all'autovalore E, chiaramente

$$|\Psi_H\rangle = e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}e^{-\frac{i}{\hbar}Et}|\Psi_S\rangle \equiv |\Psi_S\rangle$$

dove $|\Psi_S\rangle$ è lo stato (stazionario) indipendente dal tempo. Si è cosí eliminata la dipendenza dal tempo anche nello stato $|\Psi_H\rangle$.

Due osservazioni

1. All'istante $t = 0$ le tre descrizioni coincidono:

   $$|\Psi_H\rangle = |\Psi_S(0)\rangle = |\Psi_I(0)\rangle$$

   $$\hat{O}_S = \hat{O}_H(0) = \hat{O}_I(0)$$

   come discende dalla definizione delle corrispondenti trasformazioni unitarie.

2. Consideriamo le soluzioni *stazionarie* dell'equazione di Schrödinger, aventi cioè energia definita:

   $$\hat{H}|\Psi_S(t)\rangle = E|\Psi_S(t)\rangle$$

   da tale equazione discende:

   $$e^{i\frac{\hat{H}}{\hbar}t}\hat{H}e^{-i\frac{\hat{H}}{\hbar}t}e^{i\frac{\hat{H}}{\hbar}t}|\Psi_S(t)\rangle = Ee^{i\frac{\hat{H}}{\hbar}t}|\Psi_S(t)\rangle$$

   ossia

   $$\hat{H}|\Psi_H\rangle = E|\Psi_H\rangle \tag{2.31}$$

   ciò significa che *gli stati stazionari dell'equazione di Schrödinger (omesso, ovviamente, il fattore temporale) sono gli stati in descrizione di Heisenberg.*

2.6 Accensione adiabatica

Si tratta di un "artificio matematico" che permette di generare gli autostati esatti del sistema interagente a partire da quelli del sistema non interagente.

Supponendo infatti di avere un esatto controllo di $\hat{H}_0$ e dei suoi autostati, l'idea implicita nell'accensione adiabatica consiste nell'introdurre una Hamiltoniana "di perturbazione" (interazione), dipendente dal tempo,

$$\hat{H}(t) = \hat{H}_0 + e^{-\epsilon|t|}\hat{H}_1 \quad \text{con } \epsilon > 0 \tag{2.32}$$

in modo tale che per $t \to \pm\infty$ si ritrova l'Hamiltoniana imperturbata, $\hat{H}(t) \to \hat{H}_0$, mentre per $t \to 0$ si ottiene l'Hamiltoniana completa, $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_1$. Questo artificio potrebbe rappresentare quanto avviene in un processo d'urto, durante il quale il proiettile, a grandi distanze dal bersaglio (e quindi a tempi lontani nel passato e nel futuro) è sostanzialmente libero, mentre man mano che si avvicina al centro diffusore "sente" in modo crescente l'interazione con quest'ultimo, che è pienamente efficace solo nell'istante di massimo avvicinamento (tempo $t = 0$).

Con questa tecnica si segue la sorte di tutti gli autostati di $\hat{H}_0$, che sono noti, quando si accende gradualmente l'interazione $\hat{H}_1$ col trascorrere del tempo.

Per meglio comprendere questo schema consideriamo l'evoluzione temporale di uno stato in descrizione di interazione, tenendo conto che $\hat{U}(t, t_0)$ ora dipende dal parametro ϵ:

$$|\Psi_I(t)\rangle = \hat{U}_\epsilon(t, t_0)|\Psi_I(t_0)\rangle \tag{2.33}$$

con

$$\begin{aligned} \hat{U}_\epsilon(t, t_0) \quad &= \sum_{n=0}^{\infty} \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^n \frac{1}{n!} \int_{t_0}^{t} dt_1 \ldots \int_{t_0}^{t} dt_n e^{-\epsilon(|t_1|+\ldots+|t_n|)} \\ &\qquad \times T\left(\hat{H}_1(t_1) \ldots \hat{H}_1(t_n)\right) . \end{aligned} \tag{2.34}$$

Ora t_0 deve essere un certo istante "iniziale" in cui lo stato del sistema si suppone **noto**; ciò è vero, nel caso attuale, nel limite $t_0 \to -\infty$. Infatti in tale limite $\hat{H} \to \hat{H}_0$ e quindi

$$|\Psi_S(t_0)\rangle = e^{-i\frac{E_0 t_0}{\hbar}}|\Phi_0\rangle$$

dove

$$\hat{H}_0|\Phi_0\rangle = E_0|\Phi_0\rangle .$$

Quindi il corrispondente vettore di stato in descrizione di interazione sarà:

$$|\Psi_I(t_0)\rangle = e^{i\frac{\hat{H}_0 t_0}{\hbar}} |\Psi_S(t_0)\rangle \equiv |\Phi_0\rangle \, ,$$

indipendente dal tempo.

NB. il fatto che il vettore di stato in descrizione di interazione risulti indipendente dal tempo per tempi remoti non deve sorprendere. Infatti è:

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\Psi_I(t)\rangle = e^{-\epsilon|t|}\hat{H}_1(t)|\Psi_I(t)\rangle \overset{t\to-\infty}{\longrightarrow} 0 \, .$$

Ora, se non ci fosse perturbazione alcuna, questi autostati, in descrizione di interazione, rimarrebbero costanti nel tempo, essendo le soluzioni stazionarie dell'equazione di Schrödinger imperturbata. Tuttavia quando t aumenta da $-\infty$ a 0 l'interazione si accende gradualmente e l'equazione (2.33), unitamente all'espressione esplicita di $\hat{U}_\epsilon(t, t_0)$, determina l'evoluzione temporale del vettore di stato fino all'istante $t = 0$ in cui l'interazione è totalmente efficace.

Un'altra importante osservazione riguarda la convergenza degli integrali che entrano nella definizione dell'operatore di evoluzione temporale. *Finché $\epsilon \neq 0$ l' integrale multiplo che esprime $\hat{U}_\epsilon(t, t_0)$ rimane convergente* e tutti i risultati precedenti restano validi, sicché sussiste la fondamentale relazione

$$|\Psi_H\rangle = |\Psi_I(0)\rangle = \hat{U}_\epsilon(0, -\infty)|\Phi_0\rangle \tag{2.35}$$

che esprime un autostato esatto del sistema interagente in termini di un autostato di $\hat{H}_0$.

Ma ovviamente $|\Psi_H\rangle$ non può dipendere da ϵ. Occorre allora passare al limite per $\epsilon \to 0$. Si osservi che questo equivale ad accendere (o spegnere) $\hat{H}_1$ infinitamente adagio (vedi fig. 2.2). Nel limite $\epsilon \to 0$ in generale la (2.35) diverge. Ma soccorre allora il

2.6.1 Teorema di Gell–Mann e Low

Se esiste, <u>a tutti gli ordini perturbativi</u>, il

$$\lim_{\epsilon\to 0}\frac{\hat{U}_\epsilon(0, -\infty)|\Phi_0\rangle}{\langle\Phi_0|\hat{U}_\epsilon(0, -\infty)|\Phi_0\rangle} \equiv \frac{|\Psi_0\rangle}{\langle\Phi_0|\Psi_0\rangle} \tag{2.36}$$

allora tale quantità è autostato dell'Hamiltoniana $\hat{H}$, ossia

$$\hat{H}\frac{|\Psi_0\rangle}{\langle\Phi_0|\Psi_0\rangle} = E\frac{|\Psi_0\rangle}{\langle\Phi_0|\Psi_0\rangle} \, . \tag{2.37}$$

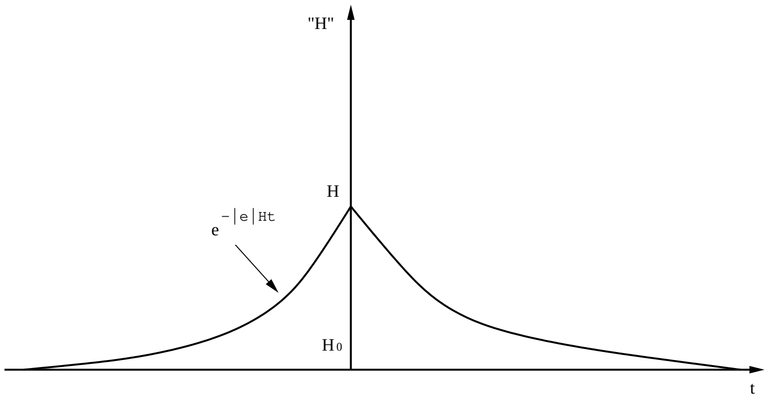


Figura 2.2: "Intensità" dell'Hamiltoniana in funzione del tempo, in presenza del fattore di accensione adiabatica.

Quindi la prescrizione usata, cioè di agire su $|\Phi_0\rangle$ con l'operatore $\hat{U}_\epsilon(0, -\infty)$, genera l'autostato di $\hat{H}$ che si sviluppa adiabaticamente da $|\Phi_0\rangle$ all'accendersi dell'interazione.

Osservazioni

1. Se $|\Phi_0\rangle$ è lo *stato fondamentale* del sistema non interagente di solito $|\Psi_0\rangle/(\langle\Phi_0|\Psi_0\rangle)$ è lo stato fondamentale di $\hat{H}$, *ma ciò non è necessariamente vero.*

   Per esempio l'energia dello stato fondamentale di certi sistemi non è analitica nella costante di accoppiamento e quindi non è esprimibile mediante una serie perturbativa.

2. Nella (2.36) numeratore e denominatore <u>non</u> esistono separatamente, anzi il denominatore serve precisamente a cancellare la divergenza del numeratore.

Deduciamo infine una importante relazione. Partiamo dall'enunciato del teorema di Gell–Mann e Low (2.37):

$$\hat{H}\frac{|\Psi_0\rangle}{\langle\Phi_0|\Psi_0\rangle} = E\frac{|\Psi_0\rangle}{\langle\Phi_0|\Psi_0\rangle}\,;$$

moltiplicando a sinistra per $\langle\Phi_0|$ otteniamo

$$\frac{\langle\Phi_0|\hat{H}_0|\Psi_0\rangle}{\langle\Phi_0|\Psi_0\rangle} + \frac{\langle\Phi_0|\hat{H}_1|\Psi_0\rangle}{\langle\Phi_0|\Psi_0\rangle} = E$$

da cui discende

$$E = E_0 + \frac{\langle\Phi_0|\hat{H}_1|\Psi_0\rangle}{\langle\Phi_0|\Psi_0\rangle} \tag{2.38}$$

che, come si vedrà in seguito, permette di esprimere l'energia dello stato fondamentale esatto attraverso una serie perturbativa ben definita e priva di singolarità.

Dimostrazione del Teorema di Gell–Mann e Low

Se la seguente quantità esiste a tutti gli ordini perturbativi:

$$\lim_{\epsilon\to 0} \frac{\hat{U}_\epsilon(0,-\infty)|\Phi_0\rangle}{\langle\Phi_0|\hat{U}_\epsilon(0,-\infty)|\Phi_0\rangle} \equiv \frac{|\Psi_0\rangle}{\langle\Phi_0|\Psi_0\rangle} \tag{2.39}$$

allora è un autostato di $\hat{H}$ (dove $\hat{H} = \hat{H}_0 + e^{-\epsilon|t|}\,\hat{H}_1$).

Consideriamo l'espressione:

$$\begin{aligned}(\hat{H}_0 - E_0)|\Psi_0(\epsilon)\rangle \qquad &= (\hat{H}_0 - E_0)\hat{U}_\epsilon(0,-\infty)|\Phi_0\rangle \\ &= [\hat{H}_0, \hat{U}_\epsilon(0,-\infty)]|\Phi_0\rangle. \end{aligned} \tag{2.40}$$

Ricordando la definizione dell'operatore di evoluzione temporale nella rappresentazione di interazione:

$$\hat{U}_\epsilon(0,-\infty) = \sum_{n=1}^{\infty} (\frac{-i}{\hbar})^n \frac{1}{n!} \int_{-\infty}^{0} dt_1 \ldots \int_{-\infty}^{0} dt_n \times \tag{2.41}$$

$$\times e^{\epsilon(t_1+\ldots+t_n)} T[\hat{H}_1(t_1)\ldots\hat{H}_1(t_n)] \tag{2.42}$$

siccome $\hat{H}_0$ non dipende da alcuno dei tempi $t_{1\ldots n}$ possiamo "farlo passare" attraverso gli integrali, scegliere un ordine temporale a piacere e concentrarci sul seguente commutatore:

$$\begin{aligned}[\hat{H}_0, \hat{H}_1(t_1)\ldots\hat{H}_1(t_n)] &= \sum_{i=1}^{n} \left\{ \left(\prod_{k=1}^{i-1} \hat{H}_1(t_k) \right) (1-\delta_{i,1}) \right\} = \\ &= [\hat{H}_0, \hat{H}_1(t_i)] \left\{ \left(\prod_{j=i+1}^{n} \hat{H}_1(t_j) \right) (1-\delta_{i,n}) + \delta_{i,n} \right\} \end{aligned} \tag{2.43}$$

Quest'ultima equazione, combinata con l'equazione del moto degli operatori in rappresentazione di interazione:

$$\frac{\hbar}{i}\frac{\partial \hat{H}_1(t)}{\partial t} = [\hat{H}_0, \hat{H}_1(t)] \tag{2.44}$$

fornisce:

$$\frac{\hbar}{i}\left(\frac{\partial}{\partial t_1}+\frac{\partial}{\partial t_1}+\ldots+\frac{\partial}{\partial t_n}\right)\hat{H}_1(t_1)\ldots\hat{H}_1(t_n) \tag{2.45}$$

che, generalizzata per tutti i possibili time orderings, dà:

$$T\left[\left(\sum_{i=1}^{n}\frac{\partial}{\partial t_i}\right)\hat{H}_1(t_1)\ldots\hat{H}_1(t_n)\right]= \tag{2.46}$$

$$=\left(\sum_{i=1}^{n}\frac{\partial}{\partial t_i}\right)T[\hat{H}_1(t_1)\ldots\hat{H}_1(t_n)]. \tag{2.47}$$

La validità dell'ultimo passaggio risulta verificata dalla seguente identità:

$$\left(\frac{\partial}{\partial t_1}+\frac{\partial}{\partial t_2}\right)\theta(t_1-t_2)=\theta'(t_1-t_2)-\theta'(t_1-t_2)=0 \tag{2.48}$$

insieme alla definizione dell'operatore di time ordering.

L'equazione (2.40) diventa dunque:

$$\begin{aligned}&(\hat{H}_0-E_0)|\Psi_0(\epsilon)\rangle= \\ &=-\sum_{n=1}^{\infty}(\frac{-i}{\hbar})^{n-1}\frac{1}{(n-1)!}\int_{-\infty}^{0}dt_1\ldots\int_{-\infty}^{0}dt_n\times \\ &\times e^{\epsilon(t_1+\ldots+t_n)}\frac{\partial}{\partial t_1}T[\hat{H}_1(t_1)\ldots\hat{H}_1(t_n)]|\Phi_0\rangle\end{aligned} \tag{2.49}$$

secondo l'osservazione che, siccome tutti i termini di derivazione temporale presenti nella precedente equazione portano lo stesso contributo all'integrale, possiamo sostituirli con $\frac{\partial}{\partial t_1}$ e moltiplicare per un fattore n.

Ora siamo pronti per integrare per parti rispetto a t_1. Questa operazione non è così triviale sotto l'operatore di time ordering e porterà a due termini, di cui uno sarà l'integrando calcolato agli estremi dell'intervallo di integrazione, mentre l'altro emerge dalla derivata *del fattore adiabatico*.

Tenendo presente la definizione di time ordering possiamo scrivere:

$$\begin{aligned}&\frac{\partial}{\partial t_1}\Big(\hat{H}_1(t_1)\ldots\hat{H}_1(t_n)\theta(t_1-t_2)\ldots\theta(t_{n-1}-t_n)+ \\ &\qquad+\hat{H}_1(t_2)\hat{H}_1(t_1)\ldots\hat{H}_1(t_n)\theta\ldots\Big)= \\ &=\Big(\hat{H}_1(t_2)\theta(t_2-t_3)\ldots\theta(t_{n-1}-t_n)+\ldots\Big)\frac{\partial\hat{H}_1(t_1)}{\partial t_1}= \\ &=T[\hat{H}_1(t_2)\ldots\hat{H}_1(t_n)]\frac{\partial\hat{H}_1(t_1)}{\partial t_1}\end{aligned} \tag{2.50}$$

che dà luogo al primo dei due termini:

$$-\hat{H}_1(0)|\Phi_0(\epsilon)\rangle \tag{2.51}$$

Per ottenere il secondo assumeremo che $\hat{H}_1$ sia proporzionale ad una costante di accoppiamento g, e scriveremo:

$$\begin{aligned} &\sum_{n=1}^{\infty}(\frac{-i}{\hbar})^{n-1}\frac{g^n}{(n-1)!}\int_{-\infty}^{0}dt_1\ldots\int_{-\infty}^{0}dt_n\times \\ &\times\frac{\partial}{\partial t_1}\left(e^{\epsilon(t_1+\ldots+t_n)}T[\hat{H}_1(t_1)\ldots\hat{H}_1(t_n)]\right)|\Phi_0\rangle \end{aligned} \tag{2.52}$$

ed osservando che:

$$(\frac{-i}{\hbar})^{n-1}\frac{g^n}{(n-1)!} = i\hbar g\frac{\partial}{\partial g}(\frac{-i}{\hbar})^{n}\frac{g^n}{(n-1)!} \tag{2.53}$$

possiamo finalmente scrivere:

$$(\hat{H}_0 - E_0)|\Psi_0(\epsilon)\rangle = -\hat{H}_1(0)|\Phi_0(\epsilon)\rangle + i\hbar g\frac{\partial}{\partial g}|\Psi_0(\epsilon)\rangle\,, \tag{2.54}$$

dato che la serie data dall'equazione (2.52) riproduce nuovamente il vettore di stato $|\Phi_0(\epsilon)\rangle$.

In termini più concisi:

$$(\hat{H} - E_0)|\Psi_0(\epsilon)\rangle = \epsilon i\hbar g\frac{\partial}{\partial g}|\Psi_0(\epsilon)\rangle. \tag{2.55}$$

Moltiplicando a sinistra per $[\langle\Phi_0|\Psi_0(\epsilon)\rangle]^{-1}\langle\Phi_0|$ e ricordando che $\frac{\partial}{\partial g}\langle\Phi_0| = 0$ troviamo:

$$\frac{\langle\Phi_0|\hat{H}_1(0)|\Psi_0(\epsilon)\rangle}{\langle\Phi_0|\Psi_0(\epsilon)\rangle}\epsilon i\hbar g\frac{\partial}{\partial g}\ln\langle\Phi_0|\Psi_0(\epsilon)\rangle \equiv E - E_0 = \Delta E\,. \tag{2.56}$$

Se facciamo tendere ϵ a zero a questo punto, dovremmo concludere che $\Delta E = 0$, il che è ovviamente impossibile. La quantità $\ln\langle\Phi_0|\Psi_0(\epsilon)\rangle$ deve dunque acquisire una fase infinita proporzionale a $i\epsilon^{-1}$ di modo che $\epsilon\ln\langle\Phi_0|\Psi_0(\epsilon)\rangle$ rimanga finito nel limite per ϵ tendente a zero.

Per ottenere ciò consideriamo la quantità:

$$\begin{aligned} &\left(\hat{H}_0 - E_0 - \epsilon i\hbar g\frac{\partial}{\partial g}\right)\frac{|\Psi_0(\epsilon)\rangle}{\langle\Phi_0|\Psi_0(\epsilon)\rangle} = \\ &= \frac{|\Psi_0(\epsilon)\rangle}{\langle\Phi_0|\Psi_0(\epsilon)\rangle}\left(\epsilon i\hbar g\frac{\partial}{\partial g}\ln\langle\Phi_0|\Psi_0(\epsilon)\rangle\right) \end{aligned} \tag{2.57}$$

dove il secondo termine emerge dalla derivata del ket $\frac{|\Psi_0(\epsilon)\rangle}{\langle\Phi_0|\Psi_0(\epsilon)\rangle}$ rispetto a g [come si può vedere dal confronto con la (2.55)]. Ora sostituendo l'espressione tra parentesi quadre a secondo membro con $E - E_0$ [cfr. 2.56] otteniamo:

$$(\hat{H} - E)\frac{|\Psi_0(\epsilon)\rangle}{\langle\Phi_0|\Psi_0(\epsilon)\rangle} = \epsilon i\hbar g \frac{\partial}{\partial g}\left(\frac{|\Psi_0(\epsilon)\rangle}{\langle\Phi_0|\Psi_0(\epsilon)\rangle}\right) \tag{2.58}$$

e facendo tendere ϵ a zero il teorema è dimostrato.

2.7 Funzione di Green (o propagatore) di particella singola

La definizione di funzione di Green di particella singola deriva, in teoria dei campi, dallo sviluppo perturbativo della matrice S; nella trattazione dei sistemi a molticorpi essa ricopre un ruolo fondamentale e costituisce uno degli ingredienti di base per la descrizione di proprietà statiche e dinamiche del sistema. La funzione di Green di particella singola è definita come il valor medio sullo stato fondamentale esatto del prodotto cronologicamente ordinato (alla Wick) di un operatore di campo e di un campo aggiunto:

$$iG_{\alpha\beta}(\vec{x}t, \vec{x'}t') = \frac{\langle\Psi_0|T\left(\hat{\Psi}_{H_\alpha}(\vec{x}t)\hat{\Psi}^\dagger_{H_\beta}(\vec{x'}t')\right)|\Psi_0\rangle}{\langle\Psi_0|\Psi_0\rangle} \tag{2.59}$$

dove $|\Psi_0\rangle$ è lo stato fondamentale in descrizione di Heisenberg, che soddisfa all'equazione

$$\hat{H}\frac{|\Psi_0\rangle}{\langle\Phi_0|\Psi_0\rangle} = E\frac{|\Psi_0\rangle}{\langle\Phi_0|\Psi_0\rangle}$$

ed anche i campi sono in descrizione di Heisenberg

$$\hat{\Psi}_{H_\alpha}(\vec{x}t) = e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}\hat{\Psi}_\alpha(\vec{x})e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}\,.$$

Il prodotto cronologicamente ordinato [già introdotto nella (2.26)] fornisce, per definizione,

$$T\left(\hat{\Psi}_{H_\alpha}(\vec{x}t)\hat{\Psi}^\dagger_{H_\beta}(\vec{x'}t')\right) = \begin{cases} \hat{\Psi}_{H_\alpha}(\vec{x}t)\hat{\Psi}^\dagger_{H_\beta}(\vec{x'}t') & t > t' \\ \pm\hat{\Psi}^\dagger_{H_\beta}(\vec{x'}t')\hat{\Psi}_{H_\alpha}(\vec{x}t) & t < t' \end{cases} \tag{2.60}$$

dove il segno + si riferisce a operatori bosonici, il segno − a operatori fermionici. In pratica il prodotto cronologico impone di ordinare gli operatori su cui agisce (in generale operatori di campo o loro prodotti) in modo tale che operatori a tempi successivi si trovino alla sinistra di operatori valutati a tempi precedenti. Nel caso fermionico, se ci fossero più di due campi, comparirebbe un segno globale $(-1)^P$, dove P è il numero di permutazioni necessario per ordinare gli operatori in ordine di tempo decrescente. [1]

Nel caso dell'operatore cronologico (2.26) introdotto per lo sviluppo iterativo dell'operatore $\hat{U}(t, t_0)$, non compaiono fattori di segno (anche ove si tratti di un sistema fermionico) poiché l'Hamiltoniana di interazione $\hat{H}_1(t)$ contiene sempre un numero pari di campi (tipicamente 4) e quindi lo scambio di due operatori $\hat{H}_1$ implica un numero pari di scambi di operatori di campo (fermionici).

Pertanto la funzione di Green (2.59) si può riscrivere come segue:

$$
\begin{aligned}
& iG_{\alpha\beta}(\vec{x}t, \vec{x'}t') = \qquad (2.61) \\
& = \begin{cases} e^{\frac{i}{\hbar}E(t-t')} \dfrac{\langle\Psi_0|\hat{\Psi}_\alpha(\vec{x})e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}(t-t')}\hat{\Psi}^\dagger_\beta(\vec{x'})|\Psi_0\rangle}{\langle\Psi_0|\Psi_0\rangle} & t > t' \\ \pm e^{-\frac{i}{\hbar}E(t-t')} \dfrac{\langle\Psi_0|\hat{\Psi}^\dagger_\beta(\vec{x'})e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}(t-t')}\hat{\Psi}_\alpha(\vec{x})|\Psi_0\rangle}{\langle\Psi_0|\Psi_0\rangle} & t < t' \end{cases}
\end{aligned}
$$

dove si è tenuto conto della dipendenza esplicita dal tempo degli operatori di campo in descrizione di Heisenberg, nonché del fatto che $|\Psi_0\rangle$ (più esattamente $|\Psi_0\rangle/\langle\Phi_0|\Psi_0\rangle$) è autostato di $\hat{H}$ con autovalore E. La (2.61) mostra come la funzione di Green dipenda solamente da $(t - t')$, se l'Hamiltoniana non ha dipendenza esplicita dal tempo.

---

[1] Sebbene il prodotto cronologico **non** coinvolga eventuali commutatori degli operatori che vengono scambiati tra loro, puó esser utile qui ricordare che le regole di commutazione o anticommutazione per gli operatori di campo bosonici (rispettivamente, fermionici) sono definiti in descrizione di Schrödinger, ossia per operatori indipendenti dal tempo:

$$
\left[\hat{\Psi}_\alpha(\vec{x}), \hat{\Psi}^\dagger_\beta(\vec{x'})\right]_\pm = \delta_{\alpha,\beta}\delta(\vec{x} - \vec{x'}) \, .
$$

Sfruttando ora la trasformazione di operatori dalla descrizione di Schrödinger a quella di Heisenberg, potremo scrivere:

$$
\begin{aligned}
& e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}\hat{\Psi}_\alpha(\vec{x})e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}\hat{\Psi}^\dagger_\beta(\vec{x'})e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t} \pm e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}\hat{\Psi}^\dagger_\beta(\vec{x'})e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}\hat{\Psi}_\alpha(\vec{x})e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t} \\
& \equiv \left[\hat{\Psi}_{H_\alpha}(\vec{x}, t), \hat{\Psi}^\dagger_{H_\beta}(\vec{x'}, t)\right]_\pm = \delta_{\alpha,\beta}\delta(\vec{x} - \vec{x'}) \, .
\end{aligned}
$$

Pertanto i commutatori canonici sono altresí definiti **per operatori di campo a tempi uguali**.

2.7.1 Relazione a osservabili

Consideriamo un operatore a *un corpo* (ovvero la sua densità) in seconda quantizzazione:

$$\hat{J}(\vec{x}) = \sum_{\alpha\beta} \hat{\Psi}^\dagger_\beta(\vec{x}) J_{\beta\alpha}(\vec{x}) \hat{\Psi}_\alpha(\vec{x}) = \hat{\Psi}^\dagger(\vec{x}) J(\vec{x}) \hat{\Psi}(\vec{x}) \,, \tag{2.62}$$

l'operatore "totale" essendo

$$\hat{J} = \int d\vec{x} \hat{J}(\vec{x}) \,.$$

Si noti che $J_{\beta\alpha}(\vec{x})$ va inteso come l'elemento di matrice nello spazio dello spin dell'operatore (in prima quantizzazione) considerato, quindi incorpora gli stati di spin $\chi^\dagger_\beta$ e χ_α, che sono associati agli indici spinoriali degli operatori di campo.

Consideriamo il valor medio della (2.62) nello stato fondamentale in descrizione di Schrödinger:

$$\begin{aligned}
\langle \hat{J}(\vec{x}) \rangle \quad &= \frac{\langle \Psi_{0S} | \hat{J}(\vec{x}) | \Psi_{0S} \rangle}{\langle \Psi_{0S} | \Psi_{0S} \rangle} \\
&= \lim_{\vec{x'} \to \vec{x}} \sum_{\alpha\beta} J_{\beta\alpha}(\vec{x}) \frac{\langle \Psi_{0S} | \hat{\Psi}^\dagger_\beta(\vec{x'}) \hat{\Psi}_\alpha(\vec{x}) | \Psi_{0S} \rangle}{\langle \Psi_{0S} | \Psi_{0S} \rangle}
\end{aligned} \tag{2.63}$$

In quest'ultimo passaggio è importante notare che $J_{\beta\alpha}(\vec{x})$, come si è già detto, è l'elemento di matrice nello spazio dello spin dell'operatore in I^a quantizzazione e, come tale, può venire estratto dal valor medio. Tuttavia $J_{\beta\alpha}(\vec{x})$ sarà in generale un operatore che agisce sulla variabile $\vec{x}$ (si pensi, ad esempio, all'operatore energia cinetica) contenuta nell'operatore di campo $\hat{\Psi}_\alpha(\vec{x})$ mentre **non** agisce sulla $\vec{x}$ dell'operatore aggiunto $\hat{\Psi}^\dagger_\beta(\vec{x})$ alla sua sinistra nella definizione (2.62). Quindi, per poter estrarre correttamente $J_{\beta\alpha}(\vec{x})$ nel membro destro dell'equazione (2.63), è stato necessario cambiare nome a tale variabile ($\hat{\Psi}^\dagger_\beta(\vec{x'})$), salvo far poi il limite indicato. In ogni caso, **prima di effettuare il limite spaziale, occorre far agire l'operatore su $\hat{\Psi}_\alpha(\vec{x})$**. Gli indici α e β ci ricordano poi che l'operatore può agire anche sullo spin della particella.

Passiamo ora alla descrizione di Heisenberg con un'appropriata manipolazione:

$$\langle \hat{J}(\vec{x}) \rangle = \lim_{\vec{x'} \to \vec{x}} \sum_{\alpha\beta} J_{\beta\alpha}(\vec{x}) \times$$

$$\times \frac{\langle\Psi_{0S}|e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}\hat{\Psi}^\dagger_\beta(\vec{x'})e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}\hat{\Psi}_\alpha(\vec{x})e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}|\Psi_{0S}\rangle}{\langle\Psi_{0S}|e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}|\Psi_{0S}\rangle}$$

$$= \lim_{t'\to t}\lim_{\vec{x'}\to\vec{x}}\sum_{\alpha\beta} J_{\beta\alpha}(\vec{x})\frac{\langle\Psi_0|\hat{\Psi}^\dagger_{H_\beta}(\vec{x'}t')\hat{\Psi}_{H_\alpha}(\vec{x},t)|\Psi_0\rangle}{\langle\Psi_0|\Psi_0\rangle} \tag{2.64}$$

$$= \pm\lim_{t'\to t^+}\lim_{\vec{x'}\to\vec{x}}\sum_{\alpha\beta} J_{\beta\alpha}(\vec{x})\frac{\langle\Psi_0|T\left\{\hat{\Psi}_{H_\alpha}(\vec{x}t)\hat{\Psi}^\dagger_{H_\beta}(\vec{x'},t')\right\}|\Psi_0\rangle}{\langle\Psi_0|\Psi_0\rangle} \tag{2.65}$$

dove, nell'ultimo passaggio, l'operatore di ordinamento cronologico si prende cura di ripristinare l'ordine originario degli operatori di campo (penultima riga dell'equazione precedente) essendo t^+ un istante di tempo infinitesimamente posteriore a t. Ne segue la REGOLA per cui **prima** bisogna far agire l'operatore di ordinamento cronologico e **poi** effettuare il limite sulla variabile temporale.

Finalmente, ricordando la definizione (2.59), si ha:

$$\langle\hat{J}(\vec{x})\rangle = \pm i\lim_{t'\to t^+}\lim_{\vec{x'}\to\vec{x}}\sum_{\alpha\beta} J_{\beta\alpha}(\vec{x})G_{\alpha\beta}(\vec{x}\,t,\vec{x'}\,t') \tag{2.66}$$

ovvero

$$\frac{\langle\Psi_{0S}|\hat{J}(\vec{x})|\Psi_{0S}\rangle}{\langle\Psi_{0S}|\Psi_{0S}\rangle} = \pm i\lim_{t'\to t^+}\lim_{\vec{x'}\to\vec{x}}\mathrm{T}r\left(J(\vec{x})G(\vec{x}\,t,\vec{x'}\,t')\right)$$

dove il $+$ vale per bosoni, il $-$ per fermioni.

Esempi

1. Operatore *densità di particelle*: numero di particelle nel volumetto $d\vec{x}$ (con qualsiasi orientazione dello spin)

   $$\hat{n}(\vec{x}) = \sum_{\alpha\beta}\int \hat{\Psi}^\dagger_\beta(\vec{x'})\delta_{\beta\alpha}\delta(\vec{x}-\vec{x'})\hat{\Psi}_\alpha(\vec{x'})d\vec{x'} = \sum_{\alpha\beta}\hat{\Psi}^\dagger_\beta(\vec{x})\delta_{\beta\alpha}\hat{\Psi}_\alpha(\vec{x})\,.$$

   Ricordiamo, al riguardo, quanto detto nel paragrafo 2.1 e osserviamo che l'operatore densità, essendo una distribuzione, acquista senso solo se integrato. Pertanto:

   $$\langle\hat{n}(\vec{x})\rangle = \pm i\lim_{t'\to t^+}\lim_{\vec{x'}\to\vec{x}}\sum_{\alpha\beta}\delta_{\beta\alpha}G_{\alpha\beta}(\vec{x}t,\vec{x'}t')$$

   ovvero

   $$\langle\hat{n}(\vec{x})\rangle = \pm i\mathrm{T}rG(\vec{x}t,\vec{x}t^+) \tag{2.67}$$

2. Operatore *densità di spin*. In analogia con l'operatore densità di particelle, lo si potrà scrivere come

$$\hat{\vec{\sigma}}(\vec{x}) = \sum_{\alpha\beta} \hat{\Psi}^{\dagger}_{\beta}(\vec{x}) \vec{\sigma}_{\beta\alpha} \hat{\Psi}_{\alpha}(\vec{x})$$

dove $\vec{\sigma}$ è una generica matrice di Pauli. Dalla (2.66) segue:

$$\langle \hat{\vec{\sigma}}(\vec{x}) \rangle = \pm i \lim_{t' \to t^+} \lim_{\vec{x'} \to \vec{x}} \mathrm{T}r \left(\vec{\sigma} G(\vec{x}t, \vec{x'}t') \right)$$

ovvero

$$\langle \hat{\vec{\sigma}}(\vec{x}) \rangle = \pm i \mathrm{T}r \left(\vec{\sigma} G(\vec{x}\, t, \vec{x}\, t^+) \right) \tag{2.68}$$

Come vedremo in seguito, se la parità é conservata, $G_{\alpha\beta}$ é diagonale degli indici di spin (e quindi proporzionale alla matrice identica $\mathbf{1}_\sigma$). In questo caso la (2.68) si riduce alla traccia di una matrice di Pauli e quindi $\langle \hat{\vec{\sigma}}(\vec{x}) \rangle = 0$.

3. Operatore *energia cinetica* totale:

$$\hat{T} = \sum_{\alpha\beta} \int \hat{\Psi}^{\dagger}_{\beta}(\vec{x}) \delta_{\beta\alpha} T(\vec{x}) \hat{\Psi}_{\alpha}(\vec{x}) d\vec{x}$$

dove

$$T(\vec{x}) = -\frac{\hbar^2 \nabla^2_{\vec{x}}}{2m}$$

Questo caso ci offre un tipico esempio in cui è fondamentale far agire l'operatore *prima* di effettuare il limite $\vec{x}' \to \vec{x}$. Avremo pertanto:

$$\langle \hat{T} \rangle = \pm i \int d\vec{x} \lim_{t' \to t^+} \lim_{\vec{x'} \to \vec{x}} \left(T(\vec{x}) \mathrm{T}r G(\vec{x}\, t, \vec{x'}\, t') \right)$$

ovvero

$$\langle \hat{T} \rangle = \pm i \int d\vec{x} \lim_{\vec{x'} \to \vec{x}} \left(T(\vec{x}) \mathrm{T}r G(\vec{x}\, t, \vec{x'}\, t^+) \right) \tag{2.69}$$

2.7.2 Energia potenziale media

Come si è visto dagli esempi precedenti la funzione di Green di particella singola può essere convenientemente utilizzata per valutare i valori medi nello stato fondamentale esatto di *operatori a un corpo*. In generale, invece, per il valor medio di operatori a due corpi occorrerebbe utilizzare una funzione di Green di due particelle, opportunamente definita.

A questa regola generale fa eccezione l'energia potenziale, ossia il potenziale di interazione a due corpi contenuto nell'Hamiltoniana del sistema. Consideriamo infatti l'Hamiltoniana nella forma di *seconda quantizzazione*:

$$\begin{aligned}\hat{H} &= \sum_{\beta} \int d\vec{x} \hat{\Psi}^{\dagger}_{\beta}(\vec{x}) T(\vec{x}) \hat{\Psi}_{\beta}(\vec{x}) + \\ &+ \frac{1}{2} \sum_{\beta\beta',\gamma\gamma'} \int\int d\vec{x} d\vec{x'} \hat{\Psi}^{\dagger}_{\beta}(\vec{x}) \hat{\Psi}^{\dagger}_{\gamma}(\vec{x'}) V_{\beta\beta',\gamma\gamma'}(\vec{x},\vec{x'}) \hat{\Psi}_{\gamma'}(\vec{x'}) \hat{\Psi}_{\beta'}(\vec{x})\end{aligned} \tag{2.70}$$

Vogliamo ora calcolare

$$\begin{aligned}\langle \hat{V} \rangle = \frac{1}{2} \sum_{\beta\beta'} \sum_{\gamma\gamma'} \int\int d\vec{x} d\vec{x'} \times \\ \times \frac{\langle \Psi_0 | \hat{\Psi}^{\dagger}_{\beta}(\vec{x}) \hat{\Psi}^{\dagger}_{\gamma}(\vec{x'}) V_{\beta\beta',\gamma\gamma'}(\vec{x},\vec{x'}) \hat{\Psi}_{\gamma'}(\vec{x'}) \hat{\Psi}_{\beta'}(\vec{x}) | \Psi_0 \rangle}{\langle \Psi_0 | \Psi_0 \rangle}\end{aligned}$$

tenendo conto della simmetria, derivante dall'identità delle particelle,

$$V_{\beta\beta',\gamma\gamma'}(\vec{x},\vec{x'}) = V_{\gamma\gamma',\beta\beta'}(\vec{x'},\vec{x}) \, .$$

Per esprimere questo risultato in termini del propagatore di particella singola, cominciamo con l'osservare che, per un operatore di campo, dall'equazione del moto per gli operatori in descrizione di Heisenberg si ha

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \hat{\Psi}_{H\alpha}(\vec{x},t) = e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}t} \left[\hat{\Psi}_{\alpha}(\vec{x}), \hat{H} \right] e^{\frac{-i}{\hbar}\hat{H}t} \, .$$

Calcoliamo pertanto il commutatore

$$\begin{aligned}\left[\hat{\Psi}_{\alpha}(\vec{x}), \hat{H} \right] &= \sum_{\beta} \int d\vec{z} \left[\hat{\Psi}_{\alpha}(\vec{x}), \hat{\Psi}^{\dagger}_{\beta}(\vec{z}) T(\vec{z}) \hat{\Psi}_{\beta}(\vec{z}) \right] + \\ + \frac{1}{2} \sum_{\beta\beta',\gamma\gamma'} \int\int d\vec{z} d\vec{z'} &\left[\hat{\Psi}_{\alpha}(\vec{x}), \hat{\Psi}^{\dagger}_{\beta}(\vec{z}) \hat{\Psi}^{\dagger}_{\gamma}(\vec{z'}) V_{\beta\beta',\gamma\gamma'}(\vec{z},\vec{z'}) \hat{\Psi}_{\gamma'}(\vec{z'}) \hat{\Psi}_{\beta'}(\vec{z}) \right] = \\ &= \left[\hat{\Psi}_{\alpha}(\vec{x}), \hat{T} \right] + \left[\hat{\Psi}_{\alpha}(\vec{x}), \hat{V} \right] \, .\end{aligned}$$

Cominciamo a considerare il termine cinetico <u>per fermioni</u> (primo termine a secondo membro):

$$
\begin{aligned}
&\sum_\beta \int d\vec{z} \left[\hat{\Psi}_\alpha(\vec{x}), \hat{\Psi}^\dagger_\beta(\vec{z})T(\vec{z})\hat{\Psi}_\beta(\vec{z})\right] = \\
&= \sum_\beta \int d\vec{z} \left(\left\{\hat{\Psi}_\alpha(\vec{x}), \hat{\Psi}^\dagger_\beta(\vec{z})\right\} T(\vec{z})\hat{\Psi}_\beta(\vec{z}) - \hat{\Psi}^\dagger_\beta(\vec{z})T(\vec{z}) \left\{\hat{\Psi}_\alpha(\vec{x}), \hat{\Psi}_\beta(\vec{z})\right\}\right) \\
&= \sum_\beta \delta_{\alpha\beta} \int d\vec{z}\delta(\vec{x}-\vec{z})T(\vec{z})\hat{\Psi}_\beta(\vec{z}) = T(\vec{x})\hat{\Psi}_\alpha(\vec{x})
\end{aligned}
$$

dove si è fatto uso della proprietà:

$$
\left[\hat{A}, \hat{B}\hat{C}\right] = \left\{\hat{A}, \hat{B}\right\} \hat{C} - \hat{B}\left\{\hat{A}, \hat{C}\right\} \tag{2.71}
$$

Il commutatore con il termine potenziale richiede un po' più di algebra e fornisce:

$$
\begin{aligned}
&\left[\hat{\Psi}_\alpha(\vec{x}), \hat{\Psi}^\dagger_\beta(\vec{z})\hat{\Psi}^\dagger_\gamma(\vec{z'})V_{\beta\beta',\gamma\gamma'}(\vec{z},\vec{z'})\hat{\Psi}_{\gamma'}(\vec{z'})\hat{\Psi}_{\beta'}(\vec{z})\right] = \\
&= \left[\hat{\Psi}_\alpha(\vec{x}), \hat{\Psi}^\dagger_\beta(\vec{z})\hat{\Psi}^\dagger_\gamma(\vec{z'})\right] V_{\beta\beta',\gamma\gamma'}(\vec{z},\vec{z'})\hat{\Psi}_{\gamma'}(\vec{z'})\hat{\Psi}_{\beta'}(\vec{z}) + \\
&+\hat{\Psi}^\dagger_\beta(\vec{z})\hat{\Psi}^\dagger_\gamma(\vec{z'})V_{\beta\beta',\gamma\gamma'}(\vec{z},\vec{z'}) \underbrace{\left[\hat{\Psi}_\alpha(\vec{x}), \hat{\Psi}_{\gamma'}(\vec{z'})\hat{\Psi}_{\beta'}(\vec{z})\right]}_{nullo} = \\
&= \left(\left\{\hat{\Psi}_\alpha(\vec{x}), \hat{\Psi}^\dagger_\beta(\vec{z})\right\} \hat{\Psi}^\dagger_\gamma(\vec{z'}) - \hat{\Psi}^\dagger_\beta(\vec{z}) \left\{\hat{\Psi}_\alpha(\vec{x}), \hat{\Psi}^\dagger_\gamma(\vec{z'})\right\}\right) \times \\
&\times V_{\beta\beta',\gamma\gamma'}(\vec{z},\vec{z'})\hat{\Psi}_{\gamma'}(\vec{z'})\hat{\Psi}_{\beta'}(\vec{z}) = \\
= \quad &\delta_{\alpha\beta}\delta(\vec{x}-\vec{z})\hat{\Psi}^\dagger_\gamma(\vec{z'})V_{\beta\beta',\gamma\gamma'}(\vec{z},\vec{z'})\hat{\Psi}_{\gamma'}(\vec{z'})\hat{\Psi}_{\beta'}(\vec{z}) + \\
&-\delta_{\alpha\gamma}\delta(\vec{x}-\vec{z'})\hat{\Psi}^\dagger_\beta(\vec{z})V_{\beta\beta',\gamma\gamma'}(\vec{z},\vec{z'})\hat{\Psi}_{\gamma'}(\vec{z'})\hat{\Psi}_{\beta'}(\vec{z}) \,.
\end{aligned}
$$

Adesso teniamo anche conto degli integrali e sommatorie presenti in $\hat{V}$ e otteniamo

$$
\begin{aligned}
\left[\hat{\Psi}_\alpha(\vec{x}), \hat{V}\right] \quad &= \frac{1}{2}\sum_{\beta'}\sum_{\gamma\gamma'} \int d\vec{z'}\hat{\Psi}^\dagger_\gamma(\vec{z'})V_{\alpha\beta',\gamma\gamma'}(\vec{x},\vec{z'})\hat{\Psi}_{\gamma'}(\vec{z'})\hat{\Psi}_{\beta'}(\vec{x}) \\
&-\frac{1}{2}\sum_{\beta\beta'}\sum_{\gamma'} \int d\vec{z}\hat{\Psi}^\dagger_\beta(\vec{z})V_{\beta\beta',\alpha\gamma'}(\vec{z},\vec{x})\hat{\Psi}_{\gamma'}(\vec{x})\hat{\Psi}_{\beta'}(\vec{z}) \,.
\end{aligned}
$$

Nell'ultimo integrale è possibile cambiare $\vec{z} \to \vec{z}'$, $\beta \to \gamma$ e scambiare $\beta' \rightleftharpoons \gamma'$ (tutti indici muti o variabili di integrazione); avremo allora

$$
\left[\hat{\Psi}_\alpha(\vec{x}), \hat{V}\right] \quad = \frac{1}{2}\sum_{\beta'}\sum_{\gamma\gamma'} \int d\vec{z'}\hat{\Psi}^\dagger_\gamma(\vec{z'})V_{\alpha\beta',\gamma\gamma'}(\vec{x},\vec{z'})\hat{\Psi}_{\gamma'}(\vec{z'})\hat{\Psi}_{\beta'}(\vec{x})
$$

$$-\frac{1}{2}\sum_{\beta'}\sum_{\gamma\gamma'}\int d\vec{z'}\,\hat{\Psi}^\dagger_\gamma(\vec{z'})V_{\gamma\gamma',\alpha\beta'}(\vec{z'},\vec{x})\hat{\Psi}_{\beta'}(\vec{x})\hat{\Psi}_{\gamma'}(\vec{z'})$$
$$=\sum_{\beta'}\sum_{\gamma\gamma'}\int d\vec{z'}\,\hat{\Psi}^\dagger_\gamma(\vec{z'})V_{\alpha\beta',\gamma\gamma'}(\vec{x},\vec{z'})\hat{\Psi}_{\gamma'}(\vec{z'})\hat{\Psi}_{\beta'}(\vec{x})\,.$$

Ne segue che il commutatore di un operatore di campo con l'Hamiltoniana è:

$$\begin{aligned}\left[\hat{\Psi}_\alpha(\vec{x}),\hat{H}\right] &= T(\vec{x})\hat{\Psi}_\alpha(\vec{x}) + \\ &+\sum_{\beta'\gamma\gamma'}\int d\vec{z'}\,\hat{\Psi}^\dagger_\gamma(\vec{z'})V_{\alpha\beta',\gamma\gamma'}(\vec{x},\vec{z'})\hat{\Psi}_{\gamma'}(\vec{z'})\hat{\Psi}_{\beta'}(\vec{x})\,.\end{aligned} \tag{2.72}$$

Allora riprendendo l'equazione del moto per l'operatore $\hat{\Psi}_{H_\alpha}(\vec{x}t)$ e *ritornando alla descrizione di Heisenberg* otteniamo

$$\begin{aligned}&\left[i\hbar\frac{\partial}{\partial t}-T(\vec{x})\right]\hat{\Psi}_{H_\alpha}(\vec{x}t) = \\ &=\sum_{\beta'\gamma\gamma'}\int d\vec{z'}\,\hat{\Psi}^\dagger_{H_\gamma}(\vec{z'}t)V_{\alpha\beta',\gamma\gamma'}(\vec{x},\vec{z'})\hat{\Psi}_{H_{\gamma'}}(\vec{z'}t)\hat{\Psi}_{H_{\beta'}}(\vec{x}t)\end{aligned}$$

da cui segue, moltiplicando a sinistra per $\hat{\Psi}^\dagger_{H_\alpha}(\vec{x'}t')$ (con $\vec{x'}\neq\vec{x}$ e $t'\neq t$) e prendendo il valor medio in $|\Psi_0\rangle$,

$$\begin{aligned}&\left[i\hbar\frac{\partial}{\partial t}-T(\vec{x})\right]\frac{\langle\Psi_0|\hat{\Psi}^\dagger_{H_\alpha}(\vec{x'}t')\hat{\Psi}_{H_\alpha}(\vec{x}t)|\Psi_0\rangle}{\langle\Psi_0|\Psi_0\rangle} = \\ &=\sum_{\beta'\gamma\gamma'}\int d\vec{z'}\,\frac{\langle\Psi_0|\hat{\Psi}^\dagger_{H_\alpha}(\vec{x'}t')\hat{\Psi}^\dagger_{H_\gamma}(\vec{z'}t)V_{\alpha\beta',\gamma\gamma'}(\vec{x},\vec{z'})\hat{\Psi}_{H_{\gamma'}}(\vec{z'}t)\hat{\Psi}_{H_{\beta'}}(\vec{x}t)|\Psi_0\rangle}{\langle\Psi_0|\Psi_0\rangle}\,.\end{aligned}$$

Ora:

i) passiamo al limite per $\vec{x'}\to\vec{x}$ (facendo attenzione a far agire prima $T(\vec{x})$ a primo membro). A secondo membro poniamo tranquillamente $\vec{x}$ al posto di $\vec{x'}$;

ii) facciamo il limite per $t'\to t^+$. A secondo membro poniamo tranquillamente $t'=t^+$. A primo membro invece si introduca il time–ordering, si commutino i campi e si compensi con un segno $-$ nel caso fermionico. Nasce in tal modo la funzione di Green.

Otteniamo pertanto (facendo prima il time–ordering e poi il limite temporale)

$$\pm i\lim_{t'\to t^+}\lim_{\vec{x'}\to\vec{x}}\left[i\hbar\frac{\partial}{\partial t}-T(\vec{x})\right]G_{\alpha\alpha}(\vec{x}t,\vec{x'}t') =$$

$$= \sum_{\beta'\gamma\gamma'} \int d\vec{z'} \frac{\langle \Psi_0 | \hat{\Psi}^\dagger_{H_\alpha}(\vec{x}t^+) \hat{\Psi}^\dagger_{H_\gamma}(\vec{z'}t) V_{\alpha\beta',\gamma\gamma'}(\vec{x},\vec{z'}) \hat{\Psi}_{H_{\gamma'}}(\vec{z'}t) \hat{\Psi}_{H_{\beta'}}(\vec{x}t) | \Psi_0 \rangle}{\langle \Psi_0 | \Psi_0 \rangle} .$$

Finalmente sommando su α, integrando su $\vec{x}$ e dividendo per 2 otteniamo il risultato desiderato:

$$\begin{aligned} \langle \hat{V} \rangle &= \pm \frac{i}{2} \int d\vec{x} \lim_{t'\to t^+} \lim_{\vec{x'}\to\vec{x}} \sum_\alpha \left[i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - T(\vec{x}) \right] G_{\alpha\alpha}(\vec{x}t, \vec{x'}t') = \\ &= \pm \frac{i}{2} \int d\vec{x} \lim_{t'\to t^+} \lim_{\vec{x'}\to\vec{x}} \left[i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - T(\vec{x}) \right] \mathrm{Tr} G(\vec{x}t, \vec{x'}t') \end{aligned} \tag{2.73}$$

Si noti che va rigorosamente preservato l'ordine con cui si effettuano le varie operazioni: prima le derivate, poi i limiti e infine l'integrale. **Il limite e l'integrale non si devono scambiare**.

D'altra parte abbiamo precedentemente visto che

$$\langle \hat{T} \rangle = \pm i \int d\vec{x} \lim_{\vec{x'}\to\vec{x}} \left(T(\vec{x}) \mathrm{Tr} G(\vec{x}t, \vec{x'}t^+) \right)$$

e, combinando i due risultati, otteniamo l'importante espressione:

$$\begin{aligned} E &\equiv \langle \hat{H} \rangle = \langle \hat{T} + \hat{V} \rangle = \\ &= \pm \frac{i}{2} \int d\vec{x} \lim_{t'\to t^+} \lim_{\vec{x'}\to\vec{x}} \left[i\hbar \frac{\partial}{\partial t} + T(\vec{x}) \right] \mathrm{Tr} G(\vec{x}t, \vec{x'}t') , \end{aligned} \tag{2.74}$$

che fornisce l'energia del sistema nello stato fondamentale esatto.

2.8 Spazio degli impulsi

L'importante formula precedente acquista una veste ancora più semplice per un sistema omogeneo infinito dove la funzione di Green dipende dalla differenza non solo tra i tempi, $(t - t')$, ma anche tra le variabili di tipo spaziale, $(\vec{x} - \vec{x'})$, quest'ultima proprietà discendendo dall'invarianza per traslazioni del sistema. Avremo pertanto la possibilità di esprimere la funzione di Green tramite una doppia trasformata di Fourier, rispetto al tempo ed allo spazio:

$$\begin{aligned} G_{\alpha\beta}(\vec{x}t, \vec{x'}t') &= \frac{1}{V} \sum_{\vec{k}} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} e^{i\vec{k}\cdot(\vec{x}-\vec{x'})} e^{-i\omega(t-t')} G_{\alpha\beta}(\vec{k},\omega) = \\ &= \int \frac{d\vec{k}}{(2\pi)^3} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} e^{i\vec{k}\cdot(\vec{x}-\vec{x'})} e^{-i\omega(t-t')} G_{\alpha\beta}(\vec{k},\omega) \end{aligned} \tag{2.75}$$

per cui

$$
\begin{aligned}
E = & \pm\frac{i}{2}\int d\vec{x} \lim_{t'\to t^+}\lim_{\vec{x}'\to\vec{x}}\left[i\hbar\frac{\partial}{\partial t} - \frac{\hbar^2\nabla^2_{\vec{x}}}{2m}\right]\times \\
& \times\int_{-\infty}^{\infty}\frac{d\omega}{2\pi}\int\frac{d\vec{k}}{(2\pi)^3}e^{i\vec{k}\cdot(\vec{x}-\vec{x}')}e^{-i\omega(t-t')}\mathrm{Tr}G(\vec{k},\omega) = \\
& = \pm\frac{i}{2}\frac{V}{(2\pi)^4}\lim_{t'\to t^+}\int d\vec{k}\int_{-\infty}^{\infty}d\omega e^{-i\omega(t-t')}\left(\hbar\omega + \frac{\hbar^2\vec{k}^2}{2m}\right)\mathrm{Tr}G(\vec{k},\omega)
\end{aligned}
$$

e, ridefinendo il limite temporale,

$$
E = \pm\frac{i}{2}\frac{V}{(2\pi)^4}\lim_{\eta\to 0^+}\int d\vec{k}\int_{-\infty}^{\infty}d\omega e^{i\omega\eta}\left(\hbar\omega + \frac{\hbar^2\vec{k}^2}{2m}\right)\mathrm{Tr}\, G(\vec{k},\omega) \tag{2.76}
$$

dove si è posto $t' - t = \eta > 0$ per mettere in evidenza le proprietà di convergenza dell'integrale su ω.

Notiamo che il volume V a denominatore della (2.75) riflette la normalizzazione in scatola delle due onde piane, $\exp\{i\vec{k}\cdot(\vec{x}-\vec{x}')\}$. Lo stesso volume appare nelle formule successive come risultato dell'integrazione su $\vec{x}$ (estesa appunto al volume di "riferimento" V).

2.8.1 Numero di particelle e densità per un sistema omogeneo infinito

Dall'equazione (2.67) si ha:

$$
\begin{aligned}
N &= \int d\vec{x}\langle\hat{n}(\vec{x})\rangle = \pm i\int d\vec{x}\,\mathrm{Tr}\, G(\vec{x}t,\vec{x}t^+) = \\
&= \pm i\int d\vec{x}\int\frac{d\vec{k}}{(2\pi)^3}\lim_{\eta\to 0^+}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{d\omega}{2\pi}e^{i\omega\eta}\mathrm{Tr}\, G(\vec{k},\omega) \\
&= \pm i\frac{V}{(2\pi)^4}\lim_{\eta\to 0^+}\int d\vec{k}\int_{-\infty}^{\infty}d\omega e^{i\omega\eta}\mathrm{Tr}\, G(\vec{k},\omega)
\end{aligned}
$$

e quindi per la densità si ottiene:

$$
\frac{N}{V} = \pm\frac{i}{(2\pi)^4}\lim_{\eta\to 0^+}\int d\vec{k}\int_{-\infty}^{\infty}d\omega e^{i\omega\eta}\mathrm{Tr}\, G(\vec{k},\omega)\,. \tag{2.77}
$$

Tale espressione, *essendo relativa ad un sistema omogeneo infinito*, coincide con il valor medio dell'operatore densità:

$$
\begin{aligned}
\langle\hat{n}(\vec{x})\rangle &= \pm i\mathrm{Tr}\, G(\vec{x}t,\vec{x}t^+) \\
&= \pm i\int\frac{d\vec{k}}{(2\pi)^3}\lim_{\eta\to 0^+}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{d\omega}{2\pi}e^{i\omega\eta}\mathrm{Tr}\, G(\vec{k},\omega)\,.
\end{aligned} \tag{2.78}
$$

Se poi il sistema non è interagente (si veda più avanti per la forma esplicita del relativo propagatore) avremo, nel caso fermionico,

$$\begin{aligned}
&\langle \hat{n}(\vec{x}) \rangle = \\
&= -2i \int \frac{d\vec{k}}{(2\pi)^3} \lim_{\eta \to 0^+} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} e^{i\omega\eta} \left[\frac{\theta(k-k_F)}{\omega - \omega_k + i\eta} + \frac{\theta(k_F - k)}{\omega - \omega_k - i\eta} \right] = \\
&= -2i \int \frac{d\vec{k}}{(2\pi)^3} 2\pi i \theta(k_F - k) \frac{1}{2\pi} = \frac{k_F^3}{3\pi^2} \qquad (2.79)
\end{aligned}$$

Si noti che in un sistema omogeneo infinito l'interazione non può modificare il valore della densità, $k_F^3/3\pi^2$, poiché:

- il numero di particelle non è alterato dall'interazione,
- la densità deve rimanere uniforme, altrimenti si perderebbe l'invarianza traslazionale.

2.9 Matrice densità a un corpo

La matrice densità a un corpo è spesso impiegata per il calcolo delle proprietà statiche dei sistemi a molticorpi in luogo del propagatore, al quale peraltro è strettamente connessa. I suoi elementi di matrice sono cosí definiti:

$$\rho_{ll'} = \langle \Psi_0 | \hat{c}_{l'}^\dagger \hat{c}_l | \Psi_0 \rangle \qquad (2.80)$$

Ricordiamo ora la definizione di operatore di campo (omettendo per brevità lo spin) e, inversamente, esprimiamo gli operatori di creazione e distruzione in un definito stato di particella singola mediante gli operatori di campo stessi (o i loro aggiunti):

$$\hat{\Psi}(\vec{x}) = \sum_k \psi_k(\vec{x}) \hat{c}_k \Longrightarrow \qquad \hat{c}_l = \int d\vec{x} \psi_l^*(\vec{x}) \hat{\Psi}(\vec{x})$$

$$\hat{\Psi}^\dagger(\vec{x}) = \sum_k \psi_k^*(\vec{x}) \hat{c}_k^\dagger \Longrightarrow \qquad \hat{c}_{l'}^\dagger = \int d\vec{x} \psi_{l'}(\vec{x}) \hat{\Psi}^\dagger(\vec{x})$$

Sostituendo tali espressioni nella (2.80) si ottiene allora

$$\begin{aligned}
\rho_{ll'} &= \int d\vec{x} \int d\vec{x'} \psi_l^*(\vec{x}) \psi_{l'}(\vec{x'}) \langle \Psi_0 | \hat{\Psi}^\dagger(\vec{x'}) \hat{\Psi}(\vec{x}) | \Psi_0 \rangle \\
&= \int d\vec{x} \int d\vec{x'} \psi_l^*(\vec{x}) \psi_{l'}(\vec{x'}) \rho(\vec{x}, \vec{x'}) \qquad (2.81)
\end{aligned}$$

dove

$$\rho(\vec{x},\vec{x'}) = \langle\Psi_0|\hat{\Psi}^\dagger(\vec{x'})\hat{\Psi}(\vec{x})|\Psi_0\rangle \tag{2.82}$$

è la *matrice densità a un corpo nello spazio delle configurazioni.* I suoi elementi diagonali forniscono la densità del sistema

$$\rho(\vec{x},\vec{x}) \equiv \tilde{\rho}(\vec{x}) = \langle\Psi_0|\hat{\Psi}^\dagger(\vec{x})\hat{\Psi}(\vec{x})|\Psi_0\rangle\,.$$

Per approfondire il significato della matrice densità a un corpo, valutiamone la doppia trasformata di Fourier per un generico sistema finito. Otterremo cosí la matrice densità a un corpo, non diagonale, nello spazio degli impulsi:

$$\begin{aligned}
n(\vec{p},\vec{p'}) &= \frac{1}{\sqrt{V}}\int d\vec{x'}e^{i\vec{p'}\cdot\vec{x'}}\frac{1}{\sqrt{V}}\int d\vec{x}e^{-i\vec{p}\cdot\vec{x}}\rho(\vec{x},\vec{x'})\\
&= \frac{1}{V}\int d\vec{x'}e^{i\vec{p'}\cdot\vec{x'}}\int d\vec{x}e^{-i\vec{p}\cdot\vec{x}}\\
&\times\langle\Psi_0|\sum_{k',\lambda'}\psi^*_{k'}(\vec{x'})_{\lambda'}\eta^\dagger_{\lambda'}\hat{a}^\dagger_{k'\lambda'}\sum_{k,\lambda}\psi_k(\vec{x})_\lambda\eta_\lambda\hat{a}_{k,\lambda}|\Psi_0\rangle\\
&= \langle\Psi_0|\sum_{k',\lambda'}a^*_{k'}(\vec{p'})\eta^\dagger_{\lambda'}\sum_{k,\lambda}a_k(\vec{p})\eta_\lambda\hat{a}^\dagger_{k'\lambda'}\hat{a}_{k,\lambda}|\Psi_0\rangle\,,
\end{aligned}$$

dove le $a_k(\vec{p}) \equiv \frac{1}{\sqrt{V}}\int d\vec{x}e^{-i\vec{p}\cdot\vec{x}}\psi_k(\vec{x})$ sono le trasformate di Fourier delle funzioni d'onda di particella singola $\psi_k(\vec{x})$ (alias le funzioni d'onda di particella singola nello spazio degli impulsi). Sfruttando l'ortogonalità degli spinori si ha infine:

$$\begin{aligned}
n(\vec{p},\vec{p'}) &= \sum_{k,k'}\sum_{\lambda}a^*_{k'}(\vec{p'})a_k(\vec{p})\langle\Psi_0|\hat{a}^\dagger_{k'\lambda}\hat{a}_{k,\lambda}|\Psi_0\rangle =\\
&= \sum_{k,k'}\sum_{\lambda}a^*_{k'}(\vec{p'})a_k(\vec{p})\rho_{k\lambda,k'\lambda}\,.
\end{aligned} \tag{2.83}$$

2.9.1 Sistema di particelle indipendenti

Consideriamo qui il caso, particolarmente rilevante, in cui le particelle che compongono il sistema non interagiscono direttamente tra di loro (ma eventualmente siano soggette a un potenziale medio di particella singola). In tal caso lo stato fondamentale del sistema, $|\Psi_0\rangle$, **é un determinante** (nello spazio delle configurazioni), che indicheremo con $|\phi_0\rangle$.

Sistema finito fermionico ($s = 1/2$)

Si avrà:

$$\begin{aligned}\rho(\vec{x},\vec{x'}) &= \langle\phi_0|\hat{\Psi}^\dagger(\vec{x'})\hat{\Psi}(\vec{x})|\phi_0\rangle = \sum_{\lambda\lambda'}\langle\phi_0|\hat{\Psi}^\dagger_{\lambda'}(\vec{x'})\eta^\dagger_{\lambda'}\hat{\Psi}_\lambda(\vec{x})\eta_\lambda|\phi_0\rangle \\ &= \sum_{\lambda\lambda'}\sum_{kk'}\psi^*_{k'}(\vec{x'})_{\lambda'}\psi_k(\vec{x})_\lambda\langle\phi_0|\hat{a}^\dagger_{k'\lambda'}\hat{a}_{k\lambda}|\phi_0\rangle\delta_{\lambda\lambda'}\end{aligned}$$

Osservando che, poiché $\hat{a}_{k\lambda}$ può distruggere una particella solo in uno stato occupato e $\hat{a}^\dagger_{k'\lambda'}$ deve ricrearla nello stesso stato (onde ripristinare $|\phi_0\rangle$), l'elemento di matrice risulta:

$$\langle\phi_0|\hat{a}^\dagger_{k'\lambda'}\hat{a}_{k\lambda}|\phi_0\rangle = \delta_{k,k'}\delta_{\lambda\lambda'}\theta(\epsilon_F-\epsilon_k), \tag{2.84}$$

e si ottiene

$$\begin{aligned}\rho(\vec{x},\vec{x'}) &= \sum_{\lambda\lambda'}\sum_{kk'}\theta(\epsilon_F-\epsilon_k)\psi^*_{k'}(\vec{x'})_{\lambda'}\psi_k(\vec{x})_\lambda\delta_{kk'}\delta_{\lambda\lambda'} = \\ &= \sum_{\lambda}\sum_{k=1}^{N/2}\psi^*_k(\vec{x'})_\lambda\psi_k(\vec{x})_\lambda = 2\sum_{k=1}^{N/2}\psi^*_k(\vec{x'})\psi_k(\vec{x})\,.\end{aligned}$$

Si noti che ponendo $\vec{x}=\vec{x'}$ si ottiene la notevole formula

$$\tilde{\rho}(\vec{x}) \equiv \rho(\vec{x},\vec{x}) = 2\sum_{k=1}^{N/2}|\psi_k(\vec{x})|^2,$$

che fornisce la densità nello stato fondamentale di un sistema di N particelle non interagenti che si collocano negli $N/2$ stati di particella singola più bassi ψ_k, ciascuno occupato da due fermioni con spin opposti.

Sempre nel caso in cui $|\Psi_0\rangle$ sia un monodeterminante $|\phi_0\rangle$, la matrice densità nello spazio degli impulsi, equazione (2.83), si riduce alla forma seguente:

$$n(\vec{p},\vec{p'}) = 2\sum_k a^*_k(\vec{p'})a_k(\vec{p})\theta(\epsilon_F-\epsilon_k)\,. \tag{2.85}$$

ove il fattore 2 discende, come prima, dalla somma sullo spin. La parte diagonale della (2.85) è, più semplicemente,

$$\tilde{n}(\vec{p}) = 2\sum_k|a_k(\vec{p})|^2\,\theta(\epsilon_F-\epsilon_k) \tag{2.86}$$

Sistema omogeneo infinito fermionico ($s=1/2$)

A) Nello spazio delle coordinate le funzioni d'onda di particella singola sono:

$$\psi_{\vec{k}\lambda}(\vec{x}) \equiv \psi_{\vec{k}}(\vec{x})_\lambda \eta_\lambda = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{x}} \eta_\lambda \,. \tag{2.87}$$

Lo stato fondamentale (del gas di fermioni liberi) è definito come quello in cui sono occupati tutti gli stati (2.87) fino al livello di Fermi, caratterizzato da $|\vec{k}| = k_F$. Pertanto

$$\begin{aligned}
\rho(\vec{x}, \vec{x'}) \quad &= \sum_\lambda \sum_{k \leq k_F} \psi_k^*(\vec{x'})_\lambda \psi_k(\vec{x})_\lambda = \frac{2}{V} \sum_{k \leq k_F} e^{i\vec{k}\cdot(\vec{x}-\vec{x'})} = \\
&= \frac{2}{V} \frac{V}{(2\pi)^3} \int d\vec{k} e^{i\vec{k}\cdot(\vec{x}-\vec{x'})} \theta(k_F - k) = \\
&= \frac{1}{2\pi^2} \int_0^{k_F} k^2 dk \int_{-1}^{1} dy e^{ik|\vec{x}-\vec{x'}|y} = \\
&= \left(\frac{k_F^3}{3\pi^2} \right) \frac{3 j_1(k_F |\vec{x} - \vec{x'}|)}{k_F |\vec{x} - \vec{x'}|} \,,
\end{aligned} \tag{2.88}$$

dove si è trasformata la $\sum_k$ in $\frac{V}{(2\pi)^3} \int d^3k$ tenendo conto della densità degli stati (2.87) nello spazio k, conseguenza di condizioni al contorno periodiche sui lati di un cubo di volume V. Inoltre

$$j_1(x) = \frac{\sin x}{x^2} - \frac{\cos x}{x}$$

è la funzione sferica di Bessel di ordine uno.

Dalla (2.88), ponendo $\vec{x} = \vec{x'}$, si ottiene per la densità del sistema

$$\tilde{\rho}(\vec{x}) = \sum_\lambda \sum_{k \leq k_F} |\psi_{\vec{k}}(\vec{x})_\lambda|^2 = \frac{k_F^3}{3\pi^2}$$

B) Nello spazio degli impulsi la "funzione d'onda" di particella singola si ottiene dalla trasformata di Fourier della (2.87):

$$a_{\vec{k}\lambda}(\vec{p}) = \frac{1}{\sqrt{V}} \int d\vec{x} e^{-i\vec{p}\cdot\vec{x}} \psi_{\vec{k}\lambda}(\vec{x}) = \frac{1}{V} \int d\vec{x} e^{i(\vec{k}-\vec{p})\cdot\vec{x}} \eta_\lambda = \delta_{\vec{k},\vec{p}} \eta_\lambda \,,$$

dove V è il volume di normalizzazione (ovvero il volume che contiene il sistema). La distribuzione degli impulsi (matrice densità a un corpo nello spazio degli impulsi) sarà quindi:

$$n(\vec{p}, \vec{p'}) \quad = \sum_{k,k'} \sum_{\lambda,\lambda'} a_{k'\lambda'}^*(\vec{p'}) a_{k\lambda}(\vec{p}) \langle \phi_0 | \hat{a}_{k'\lambda}^\dagger \hat{a}_{k,\lambda} | \phi_0 \rangle =$$

$$
\begin{aligned}
&= \sum_{k,k'} \sum_{\lambda,\lambda'} \delta_{\vec{p}',\vec{k}'} \eta^{\dagger}_{\lambda'} \delta_{\vec{p},\vec{k}} \eta_{\lambda} \delta_{\vec{k},\vec{k}'} \delta_{\lambda,\lambda'} \theta(\epsilon_F - \epsilon_k) \\
&= \sum_{\lambda} \sum_{\vec{k}} \delta_{\vec{p}',\vec{k}} \delta_{\vec{p},\vec{k}} \theta(\epsilon_F - \epsilon_k) = \delta_{\vec{p},\vec{p}'} 2\theta(\epsilon_F - \epsilon_p)
\end{aligned} \tag{2.89}
$$

e cioè un'espressione diagonale. Scriveremo quindi semplicemente

$$
\tilde{n}(\vec{p}) \equiv n(\vec{p},\vec{p}) = \sum_{\lambda} \sum_{k \le k_F} |a_{\vec{k}\lambda}(\vec{p})|^2 = 2\theta(k_F - p).
$$

Osserviamo ora che cosí come la *matrice densità a un corpo diagonale* è esprimibile tramite il propagatore di particella singola in quanto entrambi forniscono il valor medio dell'operatore densità di particelle,

$$
\rho(\vec{x},\vec{x}) \equiv n(\vec{x}) = \langle \Psi_0 | \hat{n}(\vec{x}) | \Psi_0 \rangle = -i \mathrm{Tr} G(\vec{x}t, \vec{x}t^+)\,,
$$

cosí anche la *matrice densità a un corpo non diagonale* è esprimibile tramite la funzione di Green. Infatti è immediato provare che:

$$
\rho(\vec{x},\vec{x'}) = -i \lim_{t' \to t^+} \mathrm{Tr} G(\vec{x}t, \vec{x'}t^+) = -i \mathrm{Tr} G(\vec{x}t, \vec{x'}t^+). \tag{2.90}
$$

Si noti che la (2.90) è valida per qualunque sistema (anche interagente).

Verifichiamo questa relazione per un sistema omogeneo infinito non interagente. In tal caso:

$$
\begin{aligned}
\rho(\vec{x},\vec{x'}) \quad &= \rho(\vec{x} - \vec{x'}) \\
&= -i \lim_{t' \to t^+} 2 \int \frac{d\vec{k}}{(2\pi)^3} e^{i\vec{k}\cdot(\vec{x}-\vec{x'})} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} e^{-i\omega(t-t')} G^0(\vec{k},\omega) = \\
&= -2i \int \frac{d\vec{k}}{(2\pi)^3} e^{i\vec{k}\cdot(\vec{x}-\vec{x'})} \lim_{\eta \to 0^+} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} e^{i\omega\eta} \times \\
&\quad \times \left[\frac{\theta(k - k_F)}{\omega - \omega_k + i\eta} + \frac{\theta(k_F - k)}{\omega - \omega_k - i\eta} \right] = \\
&= 2 \int \frac{d\vec{k}}{(2\pi)^3} e^{i\vec{k}\cdot(\vec{x}-\vec{x'})} \theta(k_F - k) = \left(\frac{k_F^3}{3\pi^2} \right) \frac{3 j_1(k_F |\vec{x} - \vec{x'}|)}{k_F |\vec{x} - \vec{x'}|}\,,
\end{aligned}
$$

che coincide appunto con la (2.88).

2.10 Distribuzione degli impulsi

Consideriamo di nuovo la doppia trasformata di Fourier $n(\vec{p},\vec{p'})$ della off–diagonal one–body density matrix per un sistema interagente, ma traslazionalmente invariante (quale ad esempio un sistema omogeneo infinito). Per esso si è visto che $\rho(\vec{x},\vec{x'}) = \rho(\vec{x}-\vec{x'})$ e quindi potremo scrivere:

$$\begin{aligned} n(\vec{p},\vec{p'}) &= \frac{1}{V}\int d\vec{x}e^{-i\vec{p}\cdot\vec{x}}\int d\vec{x'}e^{i\vec{p'}\cdot\vec{x'}}\rho(\vec{x}-\vec{x'}) \\ &= \frac{1}{V}\int d(\vec{x}-\vec{x'})e^{-i\vec{p}\cdot(\vec{x}-\vec{x'})}\rho(\vec{x}-\vec{x'})\int d\vec{x'}e^{i\vec{x'}\cdot(\vec{p'}-\vec{p})} \end{aligned}$$

Usando ora le relazioni (2.90) e (2.75) si ottiene:

$$\begin{aligned} n(\vec{p},\vec{p'}) = -2i\delta_{\vec{p},\vec{p'}}\int d\vec{y}e^{-i\vec{p}\cdot\vec{y}}\lim_{\eta\to 0^+}\int\frac{d\vec{k}}{(2\pi)^3}e^{i\vec{k}\cdot\vec{y}}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{d\omega}{2\pi}e^{i\omega\eta}G(\vec{k},\omega) = \\ = -2i\delta_{\vec{p},\vec{p'}}\lim_{\eta\to 0^+}\int d\vec{k}\delta(\vec{p}-\vec{k})\int_{-\infty}^{\infty}\frac{d\omega}{2\pi}e^{i\omega\eta}G(\vec{k},\omega) \end{aligned}$$

e finalmente

$$n(\vec{p},\vec{p'}) = -2i\lim_{\eta\to 0^+}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{d\omega}{2\pi}e^{i\omega\eta}G(\vec{p},\omega)\delta_{\vec{p},\vec{p'}} \equiv n(p)\delta_{\vec{p},\vec{p'}}\,. \tag{2.91}$$

Questa importante formula fornisce la distribuzione di impulsi per un generico sistema di fermioni di spin 1/2 **interagente ed omogeneo**.

Se poi il sistema, oltreché traslazionalmente invariante, é anche non interagente allora la formula precedente diventa

$$\begin{aligned} n(p) &= -2i\lim_{\eta\to 0^+}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{d\omega}{2\pi}e^{i\omega\eta}\left[\frac{\theta(p-k_F)}{\omega-\omega_p+i\eta}+\frac{\theta(k_F-p)}{\omega-\omega_p-i\eta}\right] = \\ &= 2\theta(k_F-p)\,, \end{aligned} \tag{2.92}$$

che coincide con quanto precedentemente ottenuto.

Come ultima curiosità di natura matematica dimostriamo nel seguito che la (2.92) è effettivamente la doppia trasformata di Fourier dell'espressione (2.88). Infatti:

$$\begin{aligned} \tilde{n}(p) &= \int\int d\vec{x}d\vec{x'}\frac{1}{V}e^{-i\vec{p}\cdot(\vec{x}-\vec{x'})}\rho(\vec{x}-\vec{x'}) = \\ &= \frac{k_F^3}{3\pi^2}\int d\vec{z}e^{-i\vec{p}\cdot\vec{z}}\frac{3}{k_F z}j_1(k_F z) = \\ &= k_F^3\frac{2}{\pi}\int_0^{\infty}\frac{dzz^2}{k_F z}j_1(k_F z)\int_{-1}^{1}dye^{-ipzy} = \\ &= k_F^2\frac{2}{\pi}\int_0^{\infty}dzzj_1(k_F z)\frac{e^{-ipz}-e^{ipz}}{-ipz} = \\ &= \frac{k_F}{p}\frac{4}{\pi}\int_0^{\infty}dsj_1(s)\sin\left(\frac{p}{k_F}s\right) = \end{aligned}$$

$$
\begin{aligned}
&= -\frac{k_F}{p}\frac{4}{\pi}\int_0^{\infty} ds \frac{d}{ds}\left(j_0(s)\right)\sin\left(\frac{p}{k_F}s\right) = \\
&= -\frac{k_F}{p}\frac{4}{\pi}\left\{ j_0(s)\sin\left(\frac{p}{k_F}s\right)\Big|_0^{\infty} - \frac{p}{k_F}\int_0^{\infty} ds \frac{\sin s}{s}\cos\left(\frac{p}{k_F}s\right)\right\} = \\
&= \frac{4}{\pi}\int_0^{\infty} ds \frac{\sin s}{s}\cos\left(\frac{p}{k_F}s\right) = \\
&= \frac{1}{2i\pi}\int_{\infty}^{\infty}\frac{ds}{s}\left[e^{is(1+p/k_F)} - e^{-is(1-p/k_F)} + \right. \\
&\qquad \left. + e^{is(1-p/k_F)} - e^{is(1+p/k_F)}\right].
\end{aligned}
$$

Ora è facile dimostrare che, per α reale,

$$
\frac{1}{2i\pi}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{ds}{s}e^{is\alpha} \Longrightarrow \frac{1}{2i\pi}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{ds}{s-i\eta}e^{is\alpha} = \theta(\alpha)
$$

e quindi l'espressione precedente si riduce a:

$$
\begin{aligned}
\tilde{n}(p) &= 1 - \theta\left(\frac{p}{k_F} - 1\right) + \theta\left(1 - \frac{p}{k_F}\right) = \\
&= -\left[1 - \theta\left(1 - \frac{p}{k_F}\right)\right] + \theta\left(1 - \frac{p}{k_F}\right) + 1 = 2\theta(k_F - p)\,,
\end{aligned}
$$

come appunto si voleva dimostrare.

2.11 Funzione di Green di particella singola per un sistema omogeneo infinito di fermioni non interagenti

Calcoliamo ora l'espressione, già più volte precedentemente utilizzata, del propagatore di un singolo fermione in un sistema omogeneo infinito. Per un tale sistema la funzione di Green si scriverá mediante l'analisi di Fourier (tenendo conto della proprietà di invarianza per traslazioni):

$$
G_{\alpha\beta}(\vec{x}t, \vec{x}'t') = \frac{1}{V}\sum_{\vec{k}}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{d\omega}{2\pi}\, e^{i\vec{k}\cdot(\vec{x}-\vec{x}')}e^{-i\omega(t-t')}G_{\alpha\beta}(\vec{k},\omega)
$$

che, nel limite $V \to \infty$, diventa

$$
G_{\alpha\beta}(\vec{x}t, \vec{x}'t') = \frac{1}{(2\pi)^4}\int d\vec{k}\int_{-\infty}^{\infty} d\omega\, e^{i\vec{k}\cdot(\vec{x}-\vec{x}')}e^{-i\omega(t-t')}G_{\alpha\beta}(\vec{k},\omega)\ . \tag{2.93}
$$

Per calcolare esplicitamente $G_{\alpha\beta}(\vec{x}t, \vec{x'}t')$ utilizziamo, nello sviluppo dei campi, le funzioni d' onda di particella singola

$$\psi_{\vec{k}}(\vec{x})_\lambda \eta_\lambda = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{x}} \eta_\lambda \quad . \tag{2.94}$$

Avremo pertanto il seguente operatore di campo con definita proiezione di spin [nello sviluppo si mette solo la parte spaziale della (2.94)] :

$$\hat{\Psi}_\lambda(\vec{x}) = \sum_k \psi_{\vec{k}}(\vec{x})_\lambda \hat{c}_{\vec{k}\lambda} \equiv \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_k e^{i\vec{k}\cdot\vec{x}} \hat{c}_{\vec{k}\lambda} \tag{2.95}$$

dove gli operatori di creazione e distruzione sono cosí definiti

$$\hat{c}_{\vec{k}\lambda} = \begin{cases} \hat{a}_{\vec{k}\lambda} & (k > k_F) \quad \text{distruzione di una particella} \\ (-1)^{1/2-\lambda}\, \hat{b}^\dagger_{-\vec{k}-\lambda} & (k < k_F) \quad \text{creazione di un buco} \end{cases}$$

$$\hat{c}^\dagger_{\vec{k}\lambda} = \begin{cases} \hat{a}^\dagger_{\vec{k}\lambda} & (k > k_F) \quad \text{creazione di una particella} \\ (-1)^{1/2-\lambda}\, \hat{b}_{-\vec{k}-\lambda} & (k < k_F) \quad \text{distruzione di un buco} \end{cases}$$

Si noti che **questa trasformazione, che conserva gli anticommutatori, é canonica**. Infatti

$$\left\{ \hat{a}_{\vec{k}\lambda}, \hat{a}^\dagger_{\vec{k'}\lambda'} \right\} = \left\{ \hat{b}_{\vec{k}\lambda}, \hat{b}^\dagger_{\vec{k'}\lambda'} \right\} = \delta_{\vec{k}\vec{k'}} \delta_{\lambda\lambda'} \quad .$$

Possiamo allora esprimere i campi in termini degli operatori di creazione e distruzione di particelle e buchi, come segue:

$$\hat{\Psi}_\lambda(\vec{x}) = \sum_{k>k_F} \psi_{\vec{k}}(\vec{x})_\lambda\, \hat{a}_{\vec{k}\lambda} + \sum_{k<k_F} \psi_{\vec{k}}(\vec{x})_\lambda (-1)^{1/2-\lambda}\, \hat{b}^\dagger_{-\vec{k}-\lambda}$$

$$\hat{\Psi}^\dagger_\lambda(\vec{x}) = \sum_{k>k_F} \psi^*_{\vec{k}}(\vec{x})_\lambda\, \hat{a}^\dagger_{\vec{k}\lambda} + \sum_{k<k_F} \psi^*_{\vec{k}}(\vec{x})_\lambda (-1)^{1/2-\lambda}\, \hat{b}_{-\vec{k}-\lambda}$$

oppure in descrizione di Heinsenberg (o di interazione, che coincide con quella di Heisenberg per un sistema non interagente)

$$\hat{\Psi}_{I_\lambda}(\vec{x}t) = \sum_{k>k_F} \psi_{\vec{k}}(\vec{x})_\lambda e^{-i\omega_k t}\, \hat{a}_{\vec{k}\lambda} + \sum_{k<k_F} \psi_{\vec{k}}(\vec{x})_\lambda (-1)^{1/2-\lambda} e^{-i\omega_k t}\, \hat{b}^\dagger_{-\vec{k}-\lambda}$$

$$\hat{\Psi}^\dagger_{I_\lambda}(\vec{x}t) = \sum_{k>k_F} \psi^*_{\vec{k}}(\vec{x})_\lambda e^{i\omega_k t}\, \hat{a}^\dagger_{\vec{k}\lambda} + \sum_{k<k_F} \psi^*_{\vec{k}}(\vec{x})_\lambda (-1)^{1/2-\lambda} e^{i\omega_k t}\, \hat{b}_{-\vec{k}-\lambda} \ .$$

Utilizzando operatori di creazione e distruzione di particelle e buchi l'Hamiltoniana per un sistema non interagente si può altresì riscrivere come segue:

$$\hat{H}_0 = \sum_{\vec{k}\lambda} \hbar\omega_k \hat{c}^\dagger_{\vec{k}\lambda}\hat{c}_{\vec{k}\lambda} = \underbrace{\sum_{k<k_F,\lambda} \hbar\omega_k}_{\text{mare di Fermi}} + \underbrace{\sum_{k>k_F,\lambda} \hbar\omega_k\, \hat{a}^\dagger_{\vec{k}\lambda}\hat{a}_{\vec{k}\lambda}}_{\text{particelle}} - \underbrace{\sum_{k<k_F,\lambda} \hbar\omega_k\, \hat{b}^\dagger_{\vec{k}\lambda}\hat{b}_{\vec{k}\lambda}}_{\text{buchi}}$$

Si noti che la fase introdotta dagli operatori di buco é, ovviamente, ininfluente su $\hat{H}_0$.

Fatte queste premesse possiamo ora valutare la funzione di Green per fermioni non interagenti, utilizzando la definizione generale:

$$iG^0_{\alpha\beta}(\vec{x}t, \vec{x'}t') = \langle F|\, T\left(\hat{\Psi}_{I_\alpha}(\vec{x}t)\hat{\Psi}^\dagger_{I_\beta}(\vec{x'}t')\right)|F\rangle \tag{2.96}$$

dove si è indicato con $|F\rangle$ lo stato fondamentale (esatto) del sistema, coincidente, di fatto, con un *vuoto* di particelle e di buchi, ossia tale che $\hat{b}_{\vec{k}\lambda}|F\rangle = \hat{a}_{\vec{k}\lambda}|F\rangle = 0$: **gli operatori di distruzione di particelle e di buchi annichilano lo stato fondamentale del sistema (vuoto)**.

Dalla (2.96) restano pertanto due soli termini (uno per ciascun ordinamento temporale)

$$\begin{aligned} iG^0_{\alpha\beta}(\vec{x}t, \vec{x'}t') \quad &= \sum_{k>k_F} \psi_{\vec{k}}(\vec{x})_\alpha e^{-i\omega_k t} \sum_{k'>k_F} \psi^*_{\vec{k'}}(\vec{x'})_\beta e^{i\omega_{k'}t'} \times \\ &\times \langle F|\hat{a}_{\vec{k}\alpha}\hat{a}^\dagger_{\vec{k'}\beta}|F\rangle\theta(t-t') \\ &- \sum_{k'<k_F} \psi^*_{\vec{k'}}(\vec{x'})_\beta e^{i\omega_{k'}t'} \sum_{k<k_F} \psi_{\vec{k}}(\vec{x})_\alpha e^{-i\omega_k t} \times \\ &\times \langle F|\hat{b}_{-\vec{k'}-\beta}\hat{b}^\dagger_{-\vec{k}-\alpha}(-1)^{1-\alpha-\beta}|F\rangle\theta(t'-t) \end{aligned} \tag{2.97}$$

ed essendo

$$\langle F|\hat{a}_{\vec{k}\alpha}\,\hat{a}^\dagger_{\vec{k'}\beta}|F\rangle = \langle F|\hat{b}_{-\vec{k'}-\beta}\,\hat{b}^\dagger_{-\vec{k}-\alpha}|F\rangle = \delta_{\alpha\beta}\delta_{\vec{k}\vec{k'}}\,,$$

otterremo

$$\begin{aligned} iG^0_{\alpha\beta}(\vec{x}t, \vec{x'}t') \quad &= \delta_{\alpha\beta}\frac{1}{V}\sum_{\vec{k}} e^{i\vec{k}\cdot(\vec{x}-\vec{x'})}e^{-i\omega_k(t-t')} \times \\ &\times \left[\theta(k-k_F)\theta(t-t') - \theta(k_F-k)\theta(t'-t)\right]\ . \end{aligned}$$

Nel limite di volume infinito la funzione di Green di particella singola per un sistema di fermioni non interagenti risulta:

$$\begin{aligned} iG^0_{\alpha\beta}(\vec{x}t, \vec{x'}t') \quad &= \delta_{\alpha\beta}\int \frac{d\vec{k}}{(2\pi)^3} e^{i\vec{k}\cdot(\vec{x}-\vec{x'})}e^{-i\omega_k(t-t')} \times \\ &\times \left[\theta(k-k_F)\theta(t-t') - \theta(k_F-k)\theta(t'-t)\right]\ . \end{aligned} \tag{2.98}$$

Per giungere ad un'espressione più compatta della (2.98) utilizziamo la seguente rappresentazione integrale della funzione a scalino:

$$\theta(t-t') = -\int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi i}\frac{e^{-i\omega(t-t')}}{\omega+i\eta}\,, \quad \theta(t'-t) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi i}\frac{e^{-i\omega(t-t')}}{\omega-i\eta}\,.$$

Ne segue:

$$\begin{aligned} iG^0_{\alpha\beta}(\vec{x}t,\vec{x'}t') &= \delta_{\alpha\beta}\int \frac{d\vec{k}}{(2\pi)^3}e^{i\vec{k}\cdot(\vec{x}-\vec{x'})} \times \\ &\times \left\{-\int_{-\infty}^{\infty}\frac{d\omega}{2\pi i}\frac{e^{-i\omega(t-t')}}{\omega+i\eta}e^{-i\omega_k(t-t')}\theta(k-k_F)\right. \\ &\left. -\int_{-\infty}^{\infty}\frac{d\omega}{2\pi i}\frac{e^{-i\omega(t-t')}}{\omega-i\eta}e^{-i\omega_k(t-t')}\theta(k_F-k)\right\} = \\ &= \delta_{\alpha\beta}\frac{1}{2\pi i}\int\frac{d\vec{k}}{(2\pi)^3}e^{i\vec{k}\cdot(\vec{x}-\vec{x'})}\int_{-\infty}^{\infty}d\omega e^{-i(\omega+\omega_k)(t-t')} \times \\ &\times \left\{-\frac{\theta(k-k_F)}{\omega+i\eta}-\frac{\theta(k_F-k)}{\omega-i\eta}\right\} \end{aligned} \tag{2.99}$$

da cui, facendo la sostituzione $\omega \to \omega - \omega_k$, discende infine

$$\begin{aligned} G^0_{\alpha\beta}(\vec{x}t,\vec{x'}t') &= \delta_{\alpha\beta}\int\frac{d\vec{k}}{(2\pi)^3}e^{i\vec{k}\cdot(\vec{x}-\vec{x'})}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{d\omega}{2\pi}e^{-i\omega(t-t')} \times \\ &\times\left\{\frac{\theta(k-k_F)}{\omega-\omega_k+i\eta}+\frac{\theta(k_F-k)}{\omega-\omega_k-i\eta}\right\} \end{aligned} \tag{2.100}$$

NB. circa la trasformazione degli operatori si osservi che l'assenza di una particella di impulso $\vec{k}$ dal mare di Fermi implica che il sistema possiede un impulso $-\vec{k}$. Analogamente, l'assenza di una particella di spin $\frac{1}{2}$ con componente λ dal mare di Fermi implica che il sistema ha spin $\frac{1}{2}$ e componente $-\lambda$; inoltre la trasformazione a operatori di buca con definito momento angolare (e terza componente del medesimo) richiede l'introduzione di una fase che, nel caso presente di spin 1/2, risulta $(-1)^{1/2-\lambda}$.

Dal confronto tra le espressioni (2.93) e (2.100) si ottiene la forma esplicita per la funzione di Green libera nello spazio degli impulsi (già utilizzata in precedenza per derivare la densità media e la distribuzione d'impulsi in un sistema libero):

$$G^0_{\alpha\beta}(\vec{k},\omega) = \delta_{\alpha\beta}\left\{\frac{\theta(k-k_F)}{\omega-\omega_k+i\eta}+\frac{\theta(k_F-k)}{\omega-\omega_k-i\eta}\,.\right\} \tag{2.101}$$

In essa appaiono chiaramente i termini di particella ($k > k_F$) e di buca ($k \leq k_F$) con poli, rispettivamente, nel semipiano inferiore e superiore del piano complesso di ω.

2.11.1 Teorema di Pauli

Si scriva l'Hamiltoniana di un sistema interagente nel seguente modo

$$\hat{H}(\lambda) = \hat{H}_0 + \lambda \hat{H}_1 \tag{2.102}$$

con $1 \geq \lambda \geq 0$, per cui al variare del parametro λ la (2.102) può coincidere con l'Hamiltoniana esatta del sistema,

$$\hat{H}(1) = \hat{H}\,,$$

ovvero con quella del sistema non interagente,

$$\hat{H}(0) = \hat{H}_0\ .$$

Autostati e autovalori dell'Hamiltoniana (2.102) dipenderanno dal parametro λ; scriviamo l'equazione di Schrödinger stazionaria, indicando con $|\psi_0(\lambda)\rangle$ lo stato fondamentale esatto di $\hat{H}(\lambda)$:

$$\hat{H}(\lambda)|\Psi_0(\lambda)\rangle = E(\lambda)|\Psi_0(\lambda)\rangle \quad \text{con} \quad \langle\Psi_0(\lambda)|\Psi_0(\lambda)\rangle = 1$$

da cui segue

$$E(\lambda) = \langle\Psi_0(\lambda)|\hat{H}(\lambda)|\Psi_0(\lambda)\rangle\,.$$

Deriviamo ora rispetto λ

$$\begin{aligned}
\frac{dE(\lambda)}{d\lambda} &= \langle\frac{d\Psi_0(\lambda)}{d\lambda}|\hat{H}(\lambda)|\Psi_0(\lambda)\rangle + \langle\Psi_0(\lambda)\rangle|\hat{H}(\lambda)|\frac{d\Psi_0(\lambda)}{d\lambda}\rangle + \\
&+ \langle\Psi_0(\lambda)\rangle|\frac{d\hat{H}(\lambda)}{d\lambda}|\Psi_0(\lambda)\rangle = \\
&= E(\lambda)\frac{d}{d\lambda}\langle\Psi_0(\lambda)|\Psi_0(\lambda)\rangle + \langle\Psi_0(\lambda)|\hat{H}_1|\Psi_0(\lambda)\rangle
\end{aligned}$$

e poiché $\langle\Psi_0(\lambda)|\Psi_0(\lambda)\rangle$ è la norma, costante, dello stato $|\Psi_0\rangle$ (qualunque sia λ), si ottiene la relazione:

$$\frac{dE(\lambda)}{d\lambda} = \langle\Psi_0(\lambda)|\hat{H}_1|\Psi_0(\lambda)\rangle \tag{2.103}$$

da cui, integrando su λ, segue

$$\begin{aligned}
E - E_0 &= \int_0^1 \frac{d\lambda}{\lambda}\langle\Psi_0(\lambda)|\lambda\hat{H}_1|\Psi_0(\lambda)\rangle \\
&\equiv \int_0^1 \frac{d\lambda}{\lambda}\langle\Psi_0(\lambda)|\hat{H}_1(\lambda)|\Psi_0(\lambda)\rangle\,.
\end{aligned}\tag{2.104}$$

Nella (2.104) si è indicato con $E \equiv E(1)$ l'autovalore dell'Hamiltoniana esatta $\hat{H}$ e con $E_0 \equiv E(0)$ l'autovalore di energia di $\hat{H}_0$, ovvero del sistema non interagente, dato che solitamente $\hat{H}_1$ rappresenta l'energia potenziale. Nello stesso spirito l'espressione $\langle\Psi_0(\lambda)|\lambda\hat{H}_1|\Psi_0(\lambda)\rangle$ si può considerare come il valor medio sullo stato fondamentale del termine di interazione nella (2.102), e come tale esprimerlo tramite la funzione di Green di particella singola relativa alla stessa Hamiltoniana (che indicheremo con G^λ); quindi

$$\begin{aligned} E - E_0 &= \\ &= \pm\frac{i}{2}\int_0^1 \frac{d\lambda}{\lambda}\int d\vec{x} \lim_{t'\to t^+}\lim_{\vec{x}'\to\vec{x}}\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial t} - T(\vec{x})\right)\mathrm{Tr}G^\lambda(\vec{x}t,\vec{x}'t') \end{aligned} \tag{2.105}$$

Per un sistema uniforme otterremo, in particolare,

$$\begin{aligned} &E - E_0 = \\ &\pm\frac{i}{2}\int_0^1 \frac{d\lambda}{\lambda}\int d\vec{x} \lim_{t'\to t^+}\lim_{\vec{x}'\to\vec{x}}\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial t} - T(\vec{x})\right) \\ &\times\int_{-\infty}^{\infty}\frac{d\omega}{2\pi}e^{-i\omega(t-t')}\int\frac{d\vec{k}}{(2\pi)^3}e^{i\vec{k}\cdot(\vec{x}-\vec{x}')}\mathrm{Tr}G^\lambda(\vec{k},\omega) = \\ &= \pm\frac{i}{2}\frac{V}{(2\pi)^4}\lim_{\eta\to 0^+}\int_0^1\frac{d\lambda}{\lambda}\int d\vec{k}\,\times \\ &\times\int_{-\infty}^{\infty}d\omega e^{i\omega\eta}\left(\hbar\omega - \frac{\hbar^2\vec{k}^2}{2m}\right)\mathrm{Tr}G^\lambda(\vec{k},\omega) \end{aligned} \tag{2.106}$$

Si noti che nella formula precedente compare la differenza $\left(\hbar\omega - \hbar^2\vec{k}^2/2m\right)$ in luogo della somma $\left(\hbar\omega + \hbar^2\vec{k}^2/2m\right)$ che si aveva precedentemente; qui infatti il termine cinetico dell'autovalore di energia viene sottratto dall'autovalore totale e si considera solo il valor medio dell'Hamiltoniana di interazione.

2.12 Rappresentazione di Lehmann

Consideriamo la funzione di Green di particella singola per un sistema di fermioni e riscriviamola, omettendo per brevitá il denominatore e introducendo, ove necessario, delle identità espresse mediante l'insieme chiuso di autostati esatti (Ψ_n) dell'Hamiltoniana esatta del sistema. Avremo

$$iG_{\alpha\beta}(\vec{x}t,\vec{x}'t') = \langle\Psi_0|T\left(\hat{\Psi}_{H_\alpha}(\vec{x}t)\hat{\Psi}^\dagger_{H_\beta}(\vec{x}'t')\right)|\Psi_0\rangle =$$

$$
\begin{aligned}
&= \sum_n \Big\{ \theta(t-t') \langle \Psi_0 | \hat{\Psi}_{H_\alpha}(\vec{x}t) | \Psi_n \rangle \langle \Psi_n | \hat{\Psi}^\dagger_{H_\beta}(\vec{x'}t') | \Psi_0 \rangle + \\
&\quad - \theta(t'-t) \langle \Psi_0 | \hat{\Psi}^\dagger_{H_\beta}(\vec{x'}t') | \Psi_n \rangle \langle \Psi_n | \hat{\Psi}_{H_\alpha}(\vec{x}t) | \Psi_0 \rangle \Big\} = \\
&= \sum_n \Big\{ \theta(t-t') e^{-\frac{i}{\hbar}(E_n - E)(t-t')} \langle \Psi_0 | \hat{\Psi}_\alpha(\vec{x}) | \Psi_n \rangle \langle \Psi_n | \hat{\Psi}^\dagger_\beta(\vec{x'}) | \Psi_0 \rangle + \\
&\quad - \theta(t'-t) e^{\frac{i}{\hbar}(E_n - E)(t-t')} \langle \Psi_0 | \hat{\Psi}^\dagger_\beta(\vec{x'}) | \Psi_n \rangle \langle \Psi_n | \hat{\Psi}_\alpha(\vec{x}) | \Psi_0 \rangle \Big\} ,
\end{aligned}
\tag{2.107}
$$

dove si sono introdotti operatori di campo in descrizione di Schrödinger e si è sfruttata l'equazione agli autovalori $\hat{H}|\Psi_n\rangle = E_n|\Psi_n\rangle$, con $E \equiv E_0$ (autovalore dello stato fondamentale).

Consideriamo ora l'operatore numero di particelle

$$
\hat{N} = \sum_\alpha \int d\vec{x}\, \hat{\Psi}^\dagger_\alpha(\vec{x}) \hat{\Psi}_\alpha(\vec{x})
$$

che gode delle seguenti proprietá

$$
\left[\hat{N}, \hat{H}\right] = 0 , \quad \left[\hat{N}, \hat{\Psi}_\beta(\vec{z})\right] = -\hat{\Psi}_\beta(\vec{z}) , \quad \left[\hat{N}, \hat{\Psi}^\dagger_\beta(\vec{z})\right] = \hat{\Psi}^\dagger_\beta(\vec{z}).
$$

Pertanto se $|\Psi_0\rangle$ é autostato di $\hat{H}$ e $\hat{N}$, cioé se

$$
\hat{H}|\Psi_0\rangle = E|\Psi_0\rangle \qquad \hat{N}|\Psi_0\rangle = N|\Psi_0\rangle , \tag{2.108}
$$

avremo che $\hat{\Psi}_\beta(\vec{z})|\Psi_0\rangle$ e $\hat{\Psi}^\dagger_\beta(\vec{z})|\Psi_0\rangle$ saranno ancora autostati di $\hat{N}$, ma appartenenti ad autovalori del numero di particelle rispettivamente diminuiti o aumentati di un'unità, secondo le equazioni seguenti:

$$
\begin{aligned}
&\hat{N}\left(\hat{\Psi}_\beta(\vec{z})|\Psi_0\rangle\right) = (N-1)\left(\hat{\Psi}_\beta(\vec{z})|\Psi_0\rangle\right) , \\
&\hat{N}\left(\hat{\Psi}^\dagger_\beta(\vec{z})|\Psi_0\rangle\right) = (N+1)\left(\hat{\Psi}^\dagger_\beta(\vec{z})|\Psi_0\rangle\right) .
\end{aligned}
$$

Viceversa tali stati non saranno più, in generale, autostati di $\hat{H}$ (si veda, a tale proposito, il commutatore di $\hat{H}$ con l'operatore di campo valutato nella Sezione 2.7).

Ora gli stati $|\Psi_n\rangle$ utilizzati nella (2.107) (e di cui si è sfruttata la completezza), oltre ad essere autostati della Hamiltoniana esatta, includono tutti i possibili numeri di particelle. Pertanto il prodotto $\langle\Psi_n|\hat{\Psi}_\alpha(\vec{x})|\Psi_0\rangle$ ci dà l'ampiezza di probabilità che lo stato (con $N-1$ particelle) $\hat{\Psi}_\alpha(\vec{x})|\Psi_0\rangle$ sia contenuto nell'autostato $|\Psi_n(N-1)\rangle$ di $\hat{H}$, sempre con $N-1$ particelle. Per tale motivo sarà opportuno ricordare esplicitamente, nello stato, l'autostato di $\hat{N}$ da "selezionare" fra tutti i possibili autostati di $\hat{H}$. Nella (2.107) si devono infatti considerare solo stati con una particella in più o in meno rispetto al sistema originario. La funzione di Green contiene quindi una nuova caratteristica rispetto all'equazione di Schrödinger: *si devono considerare insiemi con un diverso numero di particelle.*

2.12.1 Rappresentazione mista

Dall'equazione (2.107) si nota che, per la proprietà di omogeneità del tempo, $iG_{\alpha\beta}(\vec{x}t, \vec{x'}t') \equiv iG_{\alpha\beta}(\vec{x}, \vec{x'}; t-t')$ dipende dal tempo solo attraverso la differenza $t-t'$. Si può quindi definire una parziale trasformata di Fourier (rispetto al tempo) della $G_{\alpha\beta}(\vec{x}, \vec{x'}; t-t')$, come segue:

$$
\begin{aligned}
&G_{\alpha\beta}(\vec{x}, \vec{x'}, \omega) = \int d(t-t') e^{i\omega(t-t')} G_{\alpha\beta}(\vec{x}, \vec{x'}, t-t') = \\
&= \frac{1}{i} \sum_n \Big\{ \langle \Psi_0 | \hat{\Psi}_\alpha(\vec{x}) | \Psi_n(N+1) \rangle \langle \Psi_n(N+1) | \hat{\Psi}^\dagger_\beta(\vec{x'}) | \Psi_0 \rangle \times \\
&\times \int d(t-t') e^{i\omega(t-t')} e^{-\frac{i}{\hbar}(E_n-E)(t-t')} \theta(t-t') + \\
&- \langle \Psi_0 | \hat{\Psi}^\dagger_\beta(\vec{x'}) | \Psi_n(N-1) \rangle \langle \Psi_n(N-1) | \hat{\Psi}_\alpha(\vec{x}) | \Psi_0 \rangle \times \\
&\times \int d(t-t') e^{i\omega(t-t')} e^{\frac{i}{\hbar}(E_n-E)(t-t')} \theta(t'-t) \Big\} \,.
\end{aligned}
$$

L'integrazione sul tempo si può effettuare utilizzando le rappresentazioni integrali delle funzioni $\theta(t-t')$ e $\theta(t'-t)$:

$$
\theta(t-t') = \frac{1}{2\pi i} \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega \frac{e^{i\omega(t-t')}}{\omega - i\eta} \,. \tag{2.109}
$$

$$
\theta(t'-t) = -\frac{1}{2\pi i} \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega \frac{e^{-i\omega(t'-t)}}{\omega + i\eta} \,. \tag{2.110}
$$

ottenendo:

$$
\begin{aligned}
iG_{\alpha\beta}(\vec{x}, \vec{x'}, \omega) = \sum_n \Big\{ &\langle \Psi_0 | \hat{\Psi}_\alpha(\vec{x}) | \Psi_n(N+1) \rangle \langle \Psi_n(N+1) | \hat{\Psi}^\dagger_\beta(\vec{x'}) | \Psi_0 \rangle \times \\
&\times \frac{1}{2\pi i} \int d(t-t') e^{i\omega(t-t')} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega' \frac{e^{i\omega'(t-t')}}{\omega' - i\eta} e^{-\frac{i}{\hbar}(E_n-E)(t-t')} + \\
&+ \langle \Psi_0 | \hat{\Psi}^\dagger_\beta(\vec{x'}) | \Psi_n(N-1) \rangle \langle \Psi_n(N-1) | \hat{\Psi}_\alpha(\vec{x}) | \Psi_0 \rangle \times \\
&\times \frac{1}{2\pi i} \int d(t-t') e^{i\omega(t-t')} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega' \frac{e^{i\omega'(t-t')}}{\omega' + i\eta} e^{\frac{i}{\hbar}(E_n-E)(t-t')} \Big\} =
\end{aligned}
$$

$$= i\hbar \sum_n \left\{ \frac{\langle\Psi_0|\hat{\Psi}_\alpha(\vec{x})|\Psi_n(N+1)\rangle\langle\Psi_n(N+1)|\hat{\Psi}^\dagger_\beta(\vec{x'})|\Psi_0\rangle}{\hbar\omega - (E_n - E) + i\eta} + \right.$$
$$\left. + \frac{\langle\Psi_0|\hat{\Psi}^\dagger_\beta(\vec{x'})|\Psi_n(N-1)\rangle\langle\Psi_n(N-1)|\hat{\Psi}_\alpha(\vec{x})|\Psi_0\rangle}{\hbar\omega + (E_n - E) - i\eta} \right\} \tag{2.111}$$

Nota sui denominatori di energia: indicando in modo esplicito gli autovalori di numero di particelle relativi agli stati nella (2.111) possiamo scrivere:

$$\begin{aligned} &\hbar\omega - [E_n(N+1) - E(N)] = \\ &= \hbar\omega - [E_n(N+1) - E(N+1)] - \underbrace{[E(N+1) - E(N)]}_{\text{potenziale chimico } \mu} = \\ &= \hbar\omega - \epsilon_n(N+1) - \mu\,. \end{aligned}$$

Similmente:

$$\begin{aligned} &\hbar\omega + [E_n(N-1) - E(N)] = \\ &= \hbar\omega + [E_n(N-1) - E(N-1)] - [E(N) - E(N-1)] = \\ &= \hbar\omega + \epsilon_n(N-1) - \mu\,. \end{aligned}$$

In queste espressioni si è introdotta la notazione $\epsilon_n(N)$ per l'energia di eccitazione $E_n - E$ di un sistema con N particelle e, soprattutto, la definizione di potenziale chimico, quale energia minima necessaria per aggiungere (o togliere) una particella ad un sistema lasciandolo nello stato fondamentale.[2]

La funzione di Green di particella singola in rappresentazione mista sará pertanto:

$$G_{\alpha\beta}(\vec{x},\vec{x'},\omega) = \hbar \sum_n \left\{ \frac{\langle\Psi_0|\hat{\Psi}_\alpha(\vec{x})|\Psi_n(N+1)\rangle\langle\Psi_n(N+1)|\hat{\Psi}^\dagger_\beta(\vec{x'})|\Psi_0\rangle}{\hbar\omega - \mu - \epsilon_n(N+1) + i\eta} + \right.$$
$$\left. + \frac{\langle\Psi_0|\hat{\Psi}^\dagger_\beta(\vec{x'})|\Psi_n(N-1)\rangle\langle\Psi_n(N-1)|\hat{\Psi}_\alpha(\vec{x})|\Psi_0\rangle}{\hbar\omega - \mu + \epsilon_n(N-1) - i\eta} \right\} \tag{2.112}$$

Essa mostra esplicitamente le proprietà di analicità del propagatore in funzione della frequenza ω; su queste torneremo più avanti, in relazione ad un sistema omogeneo infinito.

[2]In generale si dovrebbero definire due diversi potenziali chimici: $\mu^+ = E(N+1) - E(N)$ e $\mu^- = E(N) - E(N-1)$, in quanto l'energia "di legame" in un sistema con numero pari di particelle può differire significativamente da quella di un sistema con N dispari. Tuttavia nel seguito trascureremo questo dettaglio.

Osservazione La sommatoria $\sum_n |\Psi_n\rangle\langle\Psi_n|$ include anche lo stato fondamentale (con $N \pm 1$ particelle), nel qual caso $\epsilon_n(N \pm 1) = 0$ e i denominatori si riducono a $\hbar\omega - \mu \pm i\eta$. L'inclusione di tale stato è importante per poter sfruttare la proprietà di chiusura.

2.12.2 Invarianza traslazionale: Sistema omogeneo infinito

La rappresentazione mista esaminata nel paragrafo precedente si applica a qualsiasi sistema (finito o infinito) in quanto sfrutta unicamente l'omogeneità del tempo. Ora consideriamo invece il caso di un sistema omogeneo infinito, per il quale vale anche l'invarianza per traslazioni spaziali.

Consideriamo pertanto l'operatore impulso o momento lineare, che in seconda quantizzazione é

$$
\begin{aligned}
\hat{\vec{P}} &= \int d\vec{x}\, \hat{\Psi}^\dagger(\vec{x})\left(-i\hbar\vec{\nabla}\right)\hat{\Psi}(\vec{x}) \\
&= \sum_{\alpha\beta}\int d\vec{x}\, \hat{\Psi}^\dagger_\alpha(\vec{x})\eta^\dagger_\alpha\left(-i\hbar\vec{\nabla}\right)\hat{\Psi}_\beta(\vec{x})\eta_\beta = \\
&= \sum_\alpha \int d\vec{x}\, \hat{\Psi}^\dagger_\alpha(\vec{x})\left(-i\hbar\vec{\nabla}\right)\hat{\Psi}_\alpha(\vec{x})\,. \qquad (2.113)
\end{aligned}
$$

Nel caso di un sistema omogeneo infinito le funzioni d'onda di particella singola sono onde piane e l'operatore impulso assume la forma più compatta:

$$
\begin{aligned}
\hat{\vec{P}} &= \sum_\alpha \int d\vec{x} \sum_{\vec{k}'} \frac{1}{\sqrt{V}} e^{-i\vec{k}'\cdot\vec{x}} \left(-i\hbar\vec{\nabla}\right) \sum_{\vec{k}} \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{x}}\, \hat{c}^\dagger_{\vec{k}'\alpha}\hat{c}_{\vec{k}\alpha} = \\
&= \sum_{\alpha\vec{k}} \hbar\vec{k}\, \hat{c}^\dagger_{\vec{k}\alpha}\hat{c}_{\vec{k}\alpha}\,. \qquad (2.114)
\end{aligned}
$$

L'operatore $\hat{\vec{P}}$ commuta con $\hat{H}$ solo nel caso in cui il sistema sia omogeneo e infinito.

Calcoliamo ora il suo commutatore con l'*operatore di campo*

$$
\begin{aligned}
\left[\hat{\Psi}_\alpha(\vec{x}), \hat{\vec{P}}\right] &= \left[\hat{\Psi}_\alpha(\vec{x}), \sum_\beta \int d\vec{z}\, \hat{\Psi}^\dagger_\beta(\vec{z})\left(-i\hbar\vec{\nabla}\right)\hat{\Psi}_\beta(\vec{z})\right] = \\
= \quad & \sum_\beta \int d\vec{z}\, \delta_{\alpha\beta}\delta(\vec{x}-\vec{z})\left(-i\hbar\vec{\nabla}\right)\hat{\Psi}_\beta(\vec{z}) = \left(-i\hbar\vec{\nabla}\right)\hat{\Psi}_\alpha(\vec{x})\,.
\end{aligned}
$$

Questa relazione implica

$$
\hat{\Psi}_\alpha(\vec{x}) = e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{\vec{P}}\cdot\vec{x}}\hat{\Psi}_\alpha(0)e^{\frac{i}{\hbar}\hat{\vec{P}}\cdot\vec{x}}\,; \qquad (2.115)
$$

infatti, sviluppando il secondo membro per piccoli $\vec{x}$, si ottiene

$$\begin{aligned}
\hat{\Psi}_\alpha(\vec{x}) &\simeq \left(1 - e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{\vec{P}}\cdot\vec{x}}\right)\hat{\Psi}_\alpha(0)\left(1 + e^{\frac{i}{\hbar}\hat{\vec{P}}\cdot\vec{x}}\right) = \\
&= \hat{\Psi}_\alpha(0) - i\frac{\hat{\vec{P}}\cdot\vec{x}}{\hbar}\hat{\Psi}_\alpha(0) + \hat{\Psi}_\alpha(0)i\frac{\hat{\vec{P}}\cdot\vec{x}}{\hbar} = \\
&= \hat{\Psi}_\alpha(0) + \frac{i}{\hbar}\left[\hat{\Psi}_\alpha(0), \hat{\vec{P}}\right]\cdot\vec{x} = \\
&= \hat{\Psi}_\alpha(0) + \frac{i}{\hbar}(-i\hbar)\vec{\nabla}\hat{\Psi}_\alpha(\vec{x})\Big|_{\vec{x}=0}\cdot\vec{x} = \\
&= \hat{\Psi}_\alpha(0) + \vec{\nabla}\hat{\Psi}_\alpha(\vec{x})\Big|_{\vec{x}=0}\cdot\vec{x}\,,
\end{aligned}$$

ossia i primi due termini dello sviluppo in serie di $\hat{\Psi}_\alpha(\vec{x})$. La (2.115) mostra che *l' operatore* $\hat{\vec{P}}$ *è il generatore di traslazioni infinitesime (e finite).*

Quando $\hat{\vec{P}}$ é una costante del moto, come set completo di stati nella (2.107) possiamo prendere gli autostati del momento lineare (ovviamente, in questo caso, anche autostati dell'Hamiltoniana). Avremo quindi

$$\begin{aligned}
&iG_{\alpha\beta}(\vec{x}t, \vec{x'}t') \equiv iG_{\alpha\beta}(\vec{x} - \vec{x'}, t - t') \qquad (2.116)\\
&= \sum_{n,\vec{P}_n}\Big\{\theta(t-t')e^{-\frac{i}{\hbar}(E_n - E)(t-t')}e^{\frac{i}{\hbar}\vec{P}_n\cdot(\vec{x}-\vec{x'})}\times \\
&\qquad \times\langle\Psi_0|\hat{\Psi}_\alpha(0)|n,\vec{P}_n\rangle\langle n,\vec{P}_n|\hat{\Psi}^\dagger_\beta(0)|\Psi_0\rangle + \\
&-\theta(t'-t)e^{\frac{i}{\hbar}(E_n - E)(t-t')}e^{-\frac{i}{\hbar}\vec{P}_n\cdot(\vec{x}-\vec{x'})}\times \\
&\qquad \times\langle\Psi_0|\hat{\Psi}^\dagger_\beta(0)|n,\vec{P}_n\rangle\langle n,\vec{P}_n|\hat{\Psi}_\alpha(0)|\Psi_0\rangle\Big\}
\end{aligned}$$

dove si è assunto che l'autovalore di $\hat{\vec{P}}$ nello stato fondamentale sia zero $\left(\hat{\vec{P}}|\Psi_0\rangle = 0\right)$.

2.12.3 Trasformata di Fourier

Dall'espressione (2.116) appare evidente che $iG_{\alpha\beta}(\vec{x}t, \vec{x'}t')$ dipende solamente dalle differenze $\vec{y} \equiv \vec{x} - \vec{x'}$ e $t - t'$ (come deve, trattandosi di un sistema omogeneo infinito). Possiamo quindi trasformare secondo Fourier anche la dipendenza spaziale:

$$G_{\alpha\beta}(\vec{k},\omega) = \int d\vec{y}\int d(t-t')e^{-i\vec{k}\cdot\vec{y}}e^{i\omega(t-t')}G_{\alpha\beta}(\vec{y}, t-t') =$$

$$= \sum_{n,\vec{P}_n} \left\{ \frac{\langle\Psi_0|\hat{\Psi}_\alpha(0)|n,\vec{P}_n\rangle\langle n,\vec{P}_n|\hat{\Psi}^\dagger_\beta(0)|\Psi_0\rangle}{\hbar\omega-\mu-\epsilon_n(N+1)+i\eta} \int d\vec{y} e^{-i\vec{k}\cdot\vec{y}} e^{\frac{i}{\hbar}\vec{P}_n\cdot\vec{y}} + \right.$$
$$\left. + \frac{\langle\Psi_0|\hat{\Psi}^\dagger_\beta(0)|n,\vec{P}_n\rangle\langle n,\vec{P}_n|\hat{\Psi}_\alpha(0)|\Psi_0\rangle}{\hbar\omega-\mu+\epsilon_n(N-1)-i\eta} \int d\vec{y} e^{-i\vec{k}\cdot\vec{y}} e^{-\frac{i}{\hbar}\vec{P}_n\cdot\vec{y}} \right\} .$$

Gli integrali sullo spazio forniscono delle δ (di Dirac o di Krönecker dipendentemente dalle condizioni al contorno):

$$\int d\vec{y} e^{-i\vec{k}\cdot\vec{y}} e^{\frac{\pm i}{\hbar}\vec{P}_n\cdot\vec{y}} = V\delta_{\vec{k},\pm\vec{P}_n/\hbar} ,$$

che consentono di eliminare la sommatoria su $\vec{P}_n$, ottenendo così , per la funzione di Green di particella singola:

$$G_{\alpha\beta}(\vec{k},\omega) = \hbar V \sum_n \left\{ \frac{\langle\Psi_0|\hat{\Psi}_\alpha(0)|n,\vec{k}\rangle\langle n,\vec{k}|\hat{\Psi}^\dagger_\beta(0)|\Psi_0\rangle}{\hbar\omega-\mu-\epsilon_{n,\vec{k}}(N+1)+i\eta} + \right.$$
$$\left. + \frac{\langle\Psi_0|\hat{\Psi}^\dagger_\beta(0)|n,-\vec{k}\rangle\langle n,-\vec{k}|\hat{\Psi}_\alpha(0)|\Psi_0\rangle}{\hbar\omega-\mu+\epsilon_{n,-\vec{k}}(N-1)-i\eta} \right\} . \tag{2.117}$$

Essa ha le dimensioni di un tempo (o inverso di frequenza ω); ricordiamo infatti che gli operatori di campo hanno le stesse dimensioni delle funzioni d'onda (qui $L^{-3/2}$). Si è anche specificato che le energie di eccitazione, $\epsilon_n \equiv \epsilon_{n,\vec{k}}$, dipendono dall'impulso che caratterizza lo stato.

Per fermioni con spin 1/2, $G_{\alpha\beta}(\vec{k},\omega)$ è una matrice 2×2; pertanto la si può scrivere nella forma

$$G_{\alpha\beta}(\vec{k},\omega) = aI_2 + b\vec{\sigma}\cdot\vec{k}$$

dove I_2 è la matrice identità dello spazio bidimensionale.

1. se l'Hamiltoniana è invariante per rotazioni, i coefficienti a e b devono essere funzioni di k^2 e ω soltanto;

2. se l'Hamiltoniana e lo stato fondamentale sono invarianti per parità (come nella maggior parte dei sistemi fisici considerati), essendo $\vec{\sigma}\cdot\vec{k}$ una quantità pseudo scalare, dovrà essere $b=0$.

In questo caso avremo quindi:

$$G_{\alpha\beta}(\vec{k},\omega) = \delta_{\alpha\beta}G(|\vec{k}|,\omega) \tag{2.118}$$

ossia il propagatore di particella singola fermionico è una matrice diagonale negli indici di spin.

2.12.4 Deduzione della funzione di Green di particella singola per un sistema non interagente dalla rappresentazione di Lehmann

Conviene osservare anzitutto che per un sistema non interagente l'indice n è pleonastico essendo l'impulso sufficiente ad individuare lo stato. Inoltre $\vec{k}$ seleziona un solo termine nella sommatoria infinita che esprime i campi:

$$\hat{\Psi}^\dagger_\beta(0) = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\vec{k'}} \left[e^{-i\vec{k'}\cdot\vec{r'}} \right]_{\vec{r'}=0} \hat{a}^\dagger_{\vec{k'}\beta} \equiv \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\vec{k'}} \hat{a}^\dagger_{\vec{k'}\beta} \,.$$

Ovviamente nel primo termine del time–ordering nella (2.117) deve essere $|\vec{k'}| > k_F$ poiché $\hat{\Psi}^\dagger_\beta(0)$ agisce sul vuoto di un sistema non interagente che ha tutti gli stati sino a k_F occupati. Invece nel secondo termine del time–ordering il campo $\hat{\Psi}_\alpha(0)$,

$$\hat{\Psi}_\alpha(0) = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\vec{k''}} \hat{a}_{\vec{k''}\alpha}$$

potrà solo distruggere un fermione in uno stato occupato, con $|\vec{k''}| \leq k_F$.

Pertanto otterremo:

$$\begin{aligned}
\langle\phi_0|\hat{\Psi}_\alpha(0)|\vec{k}\rangle\langle\vec{k}|\hat{\Psi}^\dagger_\beta(0)|\phi_0\rangle &= \frac{1}{V}\sum_{\vec{k'}\vec{k''}} \langle\phi_0|\hat{a}_{\vec{k''}\alpha}|\vec{k}\rangle\langle\vec{k}|\hat{a}^\dagger_{\vec{k'}\beta}|\phi_0\rangle \\
= \frac{1}{V}\sum_{\vec{k'}\vec{k''}} \langle\vec{k''},\alpha|\vec{k}\rangle\langle\vec{k}|\vec{k'},\beta\rangle &= \frac{1}{V}\delta_{\alpha\beta}\theta(k-k_F)
\end{aligned}$$

e analogamente

$$\begin{aligned}
\langle\phi_0|\hat{\Psi}^\dagger_\beta(0)|-\vec{k}\rangle\langle-\vec{k}|\hat{\Psi}_\alpha|\phi_0\rangle &= \frac{1}{V}\sum_{\vec{k'}\vec{k''}} \langle\phi_0|\hat{a}^\dagger_{\vec{k'}\beta}|-\vec{k}\rangle\langle-\vec{k}|\hat{a}_{\vec{k''}\alpha}|\phi_0\rangle \\
&= \frac{1}{V}\delta_{\alpha\beta}\theta(k_F-k)\,.
\end{aligned}$$

Questo risultato particolarmente semplice è conseguenza del fatto che, per un sistema non interagente, gli stati $\hat{\Psi}^\dagger_\beta(0)|\phi_0\rangle$ e $\hat{\Psi}_\alpha|\phi_0\rangle$ sono ancora autostati dell'Hamiltoniana e il loro prodotto scalare con gli stati intermedi $|\vec{k}\rangle$ fa o 0 o 1. Inoltre lo stato intermedio, essendo individuato dal solo $\vec{k}$, permette di eliminare le due sommatorie esprimenti i campi.

Consideriamo ora i denominatori di energia specificando meglio gli autovalori. Per esempio in un sistema di fermioni non interagenti avremo:

$$\epsilon_{\vec{k}}(N+1) = E_{\vec{k}}(N+1) - E(N+1) = \epsilon^0_{\vec{k}} - \epsilon^0_F = \frac{\hbar^2}{2m}(k^2 - k_F^2)$$

ossia lo stato eccitato del sistema a $(N+1)$ particelle si ottiene aggiungendo alla sfera di Fermi di N particelle una particella in uno stato $\vec{k}$ (con $|\vec{k}| > k_F$). Lo stato fondamentale è la sfera di Fermi di $(N+1)$ particelle. Analogamente l'energia di eccitazione del sistema con $(N-1)$ particelle è:

$$\epsilon_{-\vec{k}}(N-1) = E_{-\vec{k}}(N-1) - E(N-1) = \epsilon^0_F - \epsilon^0_{-\vec{k}} = \frac{\hbar^2}{2m}(k_F^2 - k^2) \ .$$

Lo stato fondamentale del sistema a $(N-1)$ particelle è di nuovo la sfera di Fermi del sistema a $(N-1)$ particelle; lo stato eccitato di impulso $-\vec{k}$ è ottenuto togliendo una particella di impulso $\vec{k}$ dalla sfera di Fermi di N particelle. Inoltre, poiché $\mu = \hbar^2 k_F^2/2m$, otterremo:

$$\begin{aligned}
&G^0_{\alpha\beta}(\vec{k},\omega) = \\
&= \delta_{\alpha\beta}\left\{ \frac{\theta(k-k_F)}{\omega - \frac{\hbar k_F^2}{2m} - \frac{\hbar(k^2-k_F^2)}{2m} + i\eta} + \frac{\theta(k_F-k)}{\omega - \frac{\hbar k_F^2}{2m} + \frac{\hbar(k^2-k_F^2)}{2m} - i\eta} \right\} = \\
&= \delta_{\alpha\beta}\left\{ \frac{\theta(k-k_F)}{\omega - \dfrac{\hbar k^2}{2m} + i\eta} + \frac{\theta(k_F-k)}{\omega - \dfrac{\hbar k^2}{2m} - i\eta} \right\} ,
\end{aligned}$$

che coincide con l'espressione (2.101) derivata precedentemente.

Notiamo le proprietà di analiticità di tale funzione nel piano complesso di ω: a fissato k essa possiede un polo singolo, rispettivamente nel semipiano Im $\omega < 0$ se $|\vec{k}| > k_F$ ovvero Im $\omega > 0$ se $|\vec{k}| \leq k_F$ (vedi fig. 2.3).

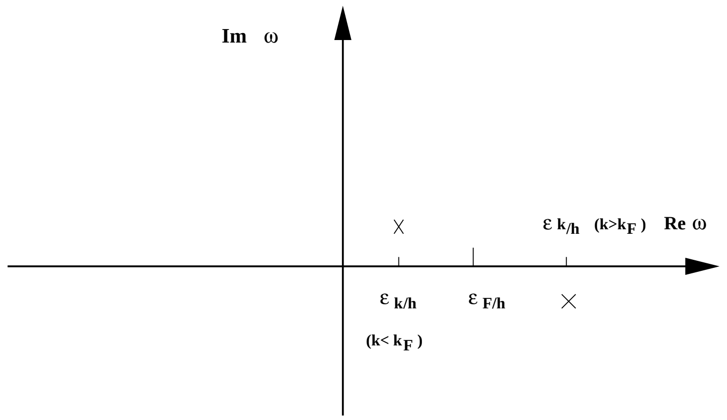


Figura 2.3: Singolarità, nel piano complesso di ω, della funzione $G^0(k,\omega)$.

2.12.5 Proprietà di analiticità

Consideriamo più in generale la funzione di Green di un sistema omogeneo di fermioni (non necessariamente liberi). Abbiamo visto che

$$\begin{aligned} G_{\alpha\beta}(\vec{k},\omega) \qquad &= \hbar V \sum_n \left\{ \frac{\langle\Psi_0|\hat{\Psi}_\alpha(0)|n,\vec{k}\rangle\langle n,\vec{k}|\hat{\Psi}^\dagger_\beta(0)|\Psi_0\rangle}{\hbar\omega-\mu-\epsilon_{n,\vec{k}}(N+1)+i\eta} + \right. \\ &\left. + \frac{\langle\Psi_0|\hat{\Psi}^\dagger_\beta(0)|n,-\vec{k}\rangle\langle n,-\vec{k}|\hat{\Psi}_\alpha(0)|\Psi_0\rangle}{\hbar\omega-\mu+\epsilon_{n,-\vec{k}}(N-1)-i\eta} \right\}. \qquad (2.119) \end{aligned}$$

Pertanto $G_{\alpha\beta}(\vec{k},\omega)$ è una funzione meromorfa di ω con una serie di poli semplici situati alle esatte energie di eccitazione del sistema interagente. Poiché queste energie derivano dalla completezza, il numero dei poli è "*infinito*", poiché tale è il numero degli stati eccitati di un sistema a $(N+1)$ oppure a $(N-1)$ particelle.

Tuttavia occorre osservare che:

a) l'operatore di campo connette lo stato fondamentale con una classe ben specifica di stati eccitati (gli stati di *singola particella* ovvero di *singolo buco*); in altre parole gli stati che effettivamente contribuiscono alla (2.119) sono solo un sottoinsieme dell'insieme completo degli autostati del sistema,

b) se $\vec{k}$ è fissato, alla (2.119) contribuisce o un solo stato eccitato (del sistema con $(N+1)$ ovvero con $(N-1)$ particelle) o comunque un *numero ristretto* di stati (stati degeneri rispetto all'impulso). Pertanto in generale i poli di $G_{\alpha\beta}(\vec{k},\omega)$ per $\vec{k}$ fissato si riducono in realtà ad uno solo.

Se invece si prescinde dal punto b) si avrà una serie infinita di poli nel piano complesso di ω, infinitesimamente prossimi all'asse reale, ma in parte nel semipiano Im $\omega < 0$ (per $\hbar\omega > \mu$) e in parte nel semipiano Im $\omega < 0$ (per $\hbar\omega < \mu$). Tale caratteristica riflette appunto l'infinità di stati di particella singola o di buco singolo.

Pertanto in questo caso si avrà una situazione del genere illustrato in fig. 2.4.

In conclusione:

i) i poli di $G_{\alpha\beta}(\vec{k},\omega)$ corrispondono alle energie di eccitazione, a impulso $\vec{k}$ fissato, del sistema con $(N+1)$ e $(N-1)$ particelle rispettivamente, *per le quali gli elementi di matrice del numeratore non di annullano*;

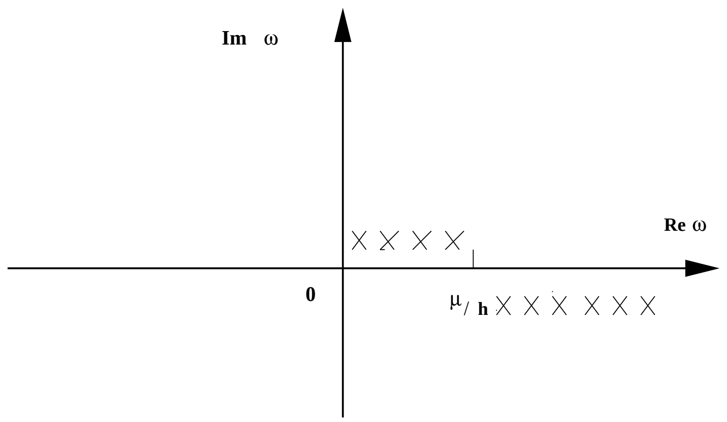


Figura 2.4: Singolarità, nel piano complesso di ω, della funzione $G(k,\omega)$.

ii) a differenza di ciò che avviene nel sistema libero, per un sistema di N particelle interagenti l'operatore di campo può **a priori** connettere lo stato fondamentale $|\Psi_0\rangle$ con più di uno stato eccitato del sistema con $(N \pm 1)$ particelle, *tutti aventi lo stesso impulso* $\vec{k}$, ma in generale ciò non succede.

2.12.6 Sistema infinito

Per un sistema infinito i livelli di energia si sovrappongono, producendo uno spettro continuo. Quindi, tenendo conto del fatto che $G_{\alpha\beta}(\vec{k},\omega)$ é diagonale negli indici di spin (ossia proporzionale alla matrice identica), potremo scrivere:

$$
\begin{aligned}
G_{\alpha\beta}(\vec{k},\omega) &= \delta_{\alpha\beta}\frac{1}{2s+1}G_{\alpha\alpha}(\vec{k},\omega) = \\
&= \frac{\delta_{\alpha\beta}\hbar V}{2s+1}\sum_n\left\{\frac{|\langle n,\vec{k}|\hat{\Psi}^\dagger_\alpha(0)|\Psi_0\rangle|^2}{\hbar\omega-\mu-\epsilon_{n,\vec{k}}(N+1)+i\eta}+\frac{|\langle n,-\vec{k}|\hat{\Psi}_\alpha(0)|\Psi_0\rangle|^2}{\hbar\omega-\mu+\epsilon_{n,-\vec{k}}(N-1)-i\eta}\right\} \\
&= \frac{\delta_{\alpha\beta}V}{2s+1}\int_{-\infty}^{\infty}d\omega'\sum_n\left\{\frac{|\langle n,\vec{k}|\hat{\Psi}^\dagger_\alpha(0)|\Psi_0\rangle|^2}{\omega-\omega'+i\eta}\delta\left[\omega'-\frac{1}{\hbar}\left(\mu+\epsilon_{n,\vec{k}}(N+1)\right)\right]+\right. \\
&\left. + \frac{|\langle n,-\vec{k}|\hat{\Psi}_\alpha(0)|\Psi_0\rangle|^2}{\omega-\omega'-i\eta}\delta\left[\omega'-\frac{1}{\hbar}\left(\mu-\epsilon_{n,-\vec{k}}(N-1)\right)\right]\right\}
\end{aligned}
\tag{2.120}
$$

NB. si divide per $2s+1$ perchè indici ripetuti si intendono sommati.

Possiamo ora definire le seguenti *funzioni spettrali*:

$$\begin{aligned} A(\vec{k},\omega') &= \\ &= \frac{V}{2s+1}\sum_n |\langle n,\vec{k}|\hat{\Psi}^\dagger_\alpha(0)|\Psi_0\rangle|^2 \delta\left[\omega' - \frac{1}{\hbar}\left(\mu + \epsilon_{n,\vec{k}}(N+1)\right)\right] \end{aligned} \tag{2.121}$$

(funzione spettrale di particella) e

$$\begin{aligned} B(\vec{k},\omega') &= \\ &= \frac{V}{2s+1}\sum_n |\langle n,-\vec{k}|\hat{\Psi}_\alpha(0)|\Psi_0\rangle|^2 \delta\left[\omega' - \frac{1}{\hbar}\left(\mu - \epsilon_{n,-\vec{k}}(N-1)\right)\right] \end{aligned} \tag{2.122}$$

(funzione spettrale di buco). Come appare evidente, le funzioni spettrali sono definite positive. In termini delle funzioni spettrali la funzione di Green di particella singola risulta:

$$G(\vec{k},\omega) = \int_{\mu/\hbar}^{\infty} d\omega' \frac{A(\vec{k},\omega')}{\omega - \omega' + i\eta} + \int_{-\infty}^{\mu/\hbar} d\omega' \frac{B(\vec{k},\omega')}{\omega - \omega' - i\eta}\,; \tag{2.123}$$

essa presenta quindi un taglio nel piano complesso di ω, lungo l'intero asse reale. Tuttavia, come nel caso precedente di una serie infinita di poli, il taglio sarà ora in parte sopra ($\hbar\omega < \mu$) e in parte sotto ($\hbar\omega > \mu$) l'asse reale stesso (vedi fig. 2.5). Ciò significa che più il sistema è grande, più i poli si avvicinano sino a fondersi in un taglio nel caso di un sistema infinito. Si osservi ancora che se il sistema infinito è non interagente, allora $\mu = \epsilon_F$ (energia libera di Fermi) e il taglio associato con la funzione spettrale di buco vivrà nell'intervallo $0 \leq \omega \leq \epsilon_F/\hbar$.

NB. I limiti di integrazione nella (2.123) derivano dalle δ di Dirac contenute nelle funzioni spettrali, tenendo conto del fatto che le energie di eccitazione sono, per definizione, quantità positive.

Nel caso libero le funzioni spettrali diventano, più semplicemente,

$$A(\vec{k},\omega') = \theta(k - k_F)\delta(\omega' - \omega_{\vec{k}}) \quad \text{(particella)}$$

$$B(\vec{k},\omega') = \theta(k_F - k)\delta(\omega' - \omega_{\vec{k}}) \quad \text{(buco)}$$

che, inserite nella (2.123), danno appunto

$$G^0(\vec{k},\omega) = \frac{\theta(k-k_F)}{\omega - \omega_{\vec{k}} + i\eta} + \frac{\theta(k_F - k)}{\omega - \omega_{\vec{k}} - i\eta}\,.$$

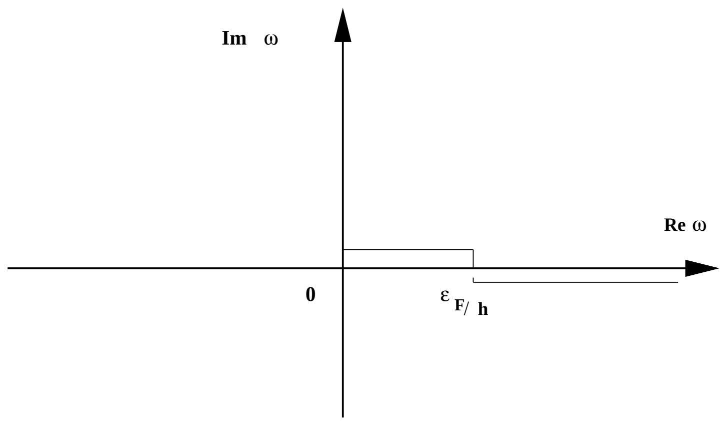


Figura 2.5: Singolarità, nel piano complesso di ω, della funzione $G(k,\omega)$ per un sistema omogeneo infinito.

2.12.7 Funzioni di Green di particella singola ritardata e avanzata

Le funzioni di Green di particella singola (o propagatori) ritardata e avanzata sono definite, rispettivamente, come:

$$iG^R_{\alpha\beta}(\vec{x}t,\vec{x'}t') = \langle\Psi_0|\left\{\hat{\Psi}_{H_\alpha}(\vec{x}t),\hat{\Psi}^\dagger_{H_\beta}(\vec{x'}t')\right\}|\Psi_0\rangle\theta(t-t') \tag{2.124}$$

$$iG^A_{\alpha\beta}(\vec{x}t,\vec{x'}t') = -\langle\Psi_0|\left\{\hat{\Psi}_{H_\alpha}(\vec{x}t),\hat{\Psi}^\dagger_{H_\beta}(\vec{x'}t')\right\}|\Psi_0\rangle\theta(t'-t) \tag{2.125}$$

Notiamo che in descrizione di Schrödinger vale la relazione di anticommutazione:

$$\left\{\hat{\Psi}_\alpha(\vec{x}),\hat{\Psi}^\dagger_\beta(\vec{x'})\right\} = \delta_{\alpha\beta}\delta(\vec{x}-\vec{x'})$$

mentre *in descrizione di Heinsenberg* tale relazione *vale solo a tempi uguali.* Pertanto le funzioni di Green precedentemente definite non sono calcolabili banalmente dall'anticommutatore dei campi.

Procedendo come per la funzione di Green "time ordered", si giunge alla seguente rappresentazione di Lehmann, valida per un sistema di fermioni omogeneo e infinito

$$G^{R,A}_{\alpha\beta}(\vec{k},\omega) \qquad = \hbar V\sum_n\left\{\frac{\langle\Psi_0|\hat{\Psi}_\alpha(0)|n,\vec{k}\rangle\langle n,\vec{k}|\hat{\Psi}^\dagger_\beta(0)|\Psi_0\rangle}{\hbar\omega-\mu-\epsilon_{n,\vec{k}}(N+1)\pm i\eta}+\right.$$

$$+ \frac{\langle \Psi_0 | \hat{\Psi}^\dagger_\beta(0) | n, -\vec{k} \rangle \langle n, -\vec{k} | \hat{\Psi}_\alpha(0) | \Psi_0 \rangle}{\hbar\omega - \mu + \epsilon_{n,-\vec{k}}(N-1) \pm i\eta} \Bigg\} , \qquad (2.126)$$

da cui si vede che anche $G^R_{\alpha\beta}(\vec{k},\omega)$ e $G^A_{\alpha\beta}(\vec{k},\omega)$ sono funzioni meromorfe di ω.

- **Proprietá fondamentali**

1. $G^R_{\alpha\beta}(\vec{k},\omega)$ è analitica regolare nel semipiano Im $\omega > 0$ (poli semplici nel semipiano Im $\omega < 0$).
2. $G^A_{\alpha\beta}(\vec{k},\omega)$ è analitica regolare nel semipiano Im $\omega < 0$ (poli semplici nel semipiano Im $\omega > 0$).
3. Inoltre, per ω reale, è

$$\left[G^R_{\alpha\beta}(\vec{k},\omega) \right]^* = G^A_{\beta\alpha}(\vec{k},\omega)$$

4. Infine per un sistema omogeneo infinito si perviene alle seguenti rappresentazioni spettrali:

$$G^{R,A}(\vec{k},\omega) = \int_{\mu/\hbar}^{\infty} d\omega' \frac{A(\vec{k},\omega')}{\omega - \omega' \pm i\eta} + \int_{-\infty}^{\mu/\hbar} d\omega' \frac{B(\vec{k},\omega')}{\omega - \omega' \pm i\eta} \qquad (2.127)$$

- **Relazione** tra $G(\vec{k},\omega)$, $G^R(\vec{k},\omega)$ e $G^A(\vec{k},\omega)$

A partire dall'equazione (2.123) e utilizzando l'identità (simbolica) di Plemely:

$$\frac{1}{\omega' - \omega \pm i\eta} = P \frac{1}{\omega' - \omega} \mp i\pi\delta(\omega - \omega') \qquad (2.128)$$

riscriviamo la funzione di Green "time-ordered" come segue:

$$G(\vec{k},\omega) = \int_{\frac{\mu}{\hbar}}^{\infty} d\omega' \frac{A(\vec{k},\omega')}{\omega - \omega' + i\eta} + \int_{-\infty}^{\frac{\mu}{\hbar}} d\omega' \frac{B(\vec{k},\omega')}{\omega - \omega' - i\eta} =$$
$$= - \int_{-\infty}^{\infty} d\omega' \frac{A(\vec{k},\omega')}{\omega' - \omega - i\eta} \theta\left(\omega' - \frac{\mu}{\hbar}\right) - \int_{-\infty}^{\infty} d\omega' \frac{B(\vec{k},\omega')}{\omega' - \omega + i\eta} \theta\left(\frac{\mu}{\hbar} - \omega'\right) =$$
$$= - \Bigg\{ P \int_{-\infty}^{\infty} d\omega' \frac{A(\vec{k},\omega')}{\omega' - \omega} \theta\left(\omega' - \frac{\mu}{\hbar}\right) + i\pi A(\vec{k},\omega) \theta\left(\omega - \frac{\mu}{\hbar}\right) +$$

$$+ P\int_{-\infty}^{\infty} d\omega' \frac{B(\vec{k},\omega')}{\omega'-\omega}\theta\left(\frac{\mu}{\hbar}-\omega'\right) - i\pi B(\vec{k},\omega)\theta\left(\frac{\mu}{\hbar}-\omega\right)\Bigg\} =$$

$$= P\int_{\frac{\mu}{\hbar}}^{\infty} d\omega' \frac{A(\vec{k},\omega')}{\omega-\omega'} - i\pi A(\vec{k},\omega)\theta\left(\omega-\frac{\mu}{\hbar}\right) +$$

$$+P\int_{-\infty}^{\frac{\mu}{\hbar}} d\omega' \frac{B(\vec{k},\omega')}{\omega-\omega'} + i\pi B(\vec{k},\omega)\theta\left(\frac{\mu}{\hbar}-\omega\right) \tag{2.129}$$

Pertanto se ne può dedurre la seguente **regola**:

1. per $\omega < \mu/\hbar$ è $\text{Im } G(\vec{k},\omega) > 0$
2. per $\omega > \mu/\hbar$ è $\text{Im } G(\vec{k},\omega) < 0$.

In altri termini, il *potenziale chimico è il valore dell'energia dove Im* $G(\vec{k},\omega)$ *cambia segno* (si ricordi che le funzioni spettrali sono definite positive).

D'altra parte è facile dimostrare che

$$G^{R,A}(\vec{k},\omega) = P\int_{\frac{\mu}{\hbar}}^{\infty} d\omega' \frac{A(\vec{k},\omega')}{\omega-\omega'} \mp i\pi A(\vec{k},\omega)\theta\left(\omega-\frac{\mu}{\hbar}\right) +$$

$$+P\int_{-\infty}^{\frac{\mu}{\hbar}} d\omega' \frac{B(\vec{k},\omega')}{\omega-\omega'} \mp i\pi B(\vec{k},\omega)\theta\left(\frac{\mu}{\hbar}-\omega\right) \tag{2.130}$$

Dunque per ω **reale** le parti reali di G^A e G^R coincidono sempre, mentre $\text{Im}G^A(\vec{k},\omega) = \text{Im}G(\vec{k},\omega)$ se $\omega < \mu/\hbar$ e $\text{Im}G^R(\vec{k},\omega) = \text{Im}G(\vec{k},\omega)$ se $\omega > \mu/\hbar$. In conclusione valgono le relazioni:

se $\omega < \mu/\hbar$ allora $G^A(\vec{k},\omega) = G(\vec{k},\omega)$
se $\omega > \mu/\hbar$ allora $G^R(\vec{k},\omega) = G(\vec{k},\omega)$.

- **Relazioni di dispersione**

Poiché $G^R(\vec{k},\omega)$ è analitica regolare per Im $\omega > 0$ segue che

$$\oint d\omega' \frac{G^R(\vec{k},\omega')}{\omega'-\omega+i\eta} = 0 \tag{2.131}$$

essendo l'integrale esteso al cammino indicato nella figura 2.6 ed ω reale.

Applicando allora l'identità (2.128) segue che

$$i\pi G^R(\vec{k},\omega) = -P\int_{-\infty}^{\infty} d\omega' \frac{G^R(\vec{k},\omega')}{\omega-\omega'} \tag{2.132}$$

purché si possa trascurare il contributo della semicirconferenza in figura (di raggio infinito). Questo dipenderà dalla dipendenza di $G^R(\vec{k},\omega')$ da ω', ma è sufficiente che per $\omega' \to \infty$ $G^R(\vec{k},\omega') = \mathcal{O}(\omega'^{-\alpha})$ con $\alpha > 0$.

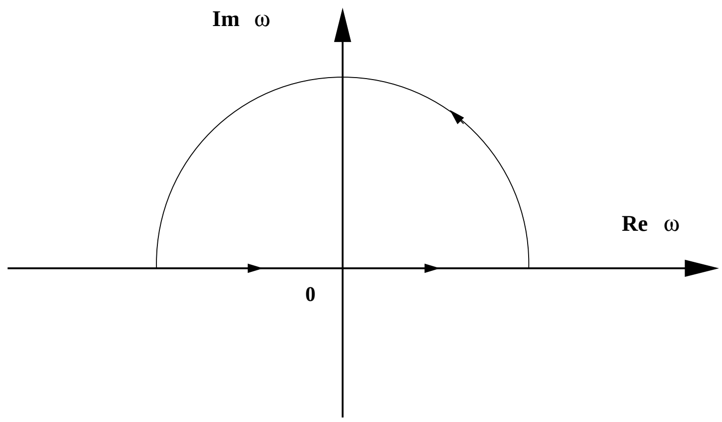


Figura 2.6: Cammino d'integrazione per l'equazione (2.131).

Prendendo la parte immaginaria di entrambi i membri nell'equazione (2.132) si trova allora che

$$\mathrm{Re}\, G^R(\vec{k}, \omega) = -P \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega'}{\pi} \frac{\mathrm{Im}\, G^R(\vec{k}, \omega')}{\omega - \omega'} \tag{2.133}$$

e analogamente

$$\mathrm{Re}\, G^A(\vec{k}, \omega) = +P \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega'}{\pi} \frac{\mathrm{Im}\, G^A(\vec{k}, \omega')}{\omega - \omega'} \, . \tag{2.134}$$

Queste due ultime espressioni sono dette appunto *relazioni di dispersione* e mostrano che del propagatore è sufficiente conoscere la parte immaginaria, specificamente quella di $G^R(\vec{k}, \omega)$ per $\omega > \mu/\hbar$ e quella di $G^A(\vec{k}, \omega)$ per $\omega < \mu/\hbar$.

- **Teorema di Titchmarsh**

Per una funzione $F(\omega)$ le tre proprietá:

i) essere analitica regolare nel semipiano superiore (inferiore) di ω,

ii) obbedire ad una relazione di dispersione

iii) avere trasformata di Fourier nulla per $t < 0$ (ovvero $t > 0$)

sono in realtà una sola, espressa in modi differenti.

- **Una "regola di somma"**

Partiamo dal valor medio dell'anticommutatore di operatori di campo (in descrizione di Schrödinger):

$$\langle\Psi_0|\left\{\hat{\Psi}_\alpha(\vec{x}),\hat{\Psi}^\dagger_\beta(\vec{x'})\right\}|\Psi_0\rangle = \delta_{\alpha\beta}\delta(\vec{x}-\vec{x'})$$

Con passaggi del tutto analoghi a quelli effettuati per derivare la rappresentazione di Lehmann, ne segue:

$$\begin{aligned}
\delta(\vec{x}-\vec{x'}) = {} & \frac{1}{2s+1}\sum_n \Big[\langle\Psi_0|\hat{\Psi}_\alpha(\vec{x})|n,\vec{P}_n\rangle\langle n,\vec{P}_n|\hat{\Psi}^\dagger_\alpha(\vec{x'})|\Psi_0\rangle \\
& + \langle\Psi_0|\hat{\Psi}^\dagger_\alpha(\vec{x'})|n,\vec{P}_n\rangle\langle n,\vec{P}_n|\hat{\Psi}_\alpha(\vec{x})|\Psi_0\rangle\Big] = \\
= {} & \frac{1}{2s+1}\sum_{n,\vec{P}_n}\Big[e^{\frac{i}{\hbar}\vec{P}_n\cdot(\vec{x}-\vec{x'})}\langle\Psi_0|\hat{\Psi}_\alpha(0)|n,\vec{P}_n\rangle\langle n,\vec{P}_n|\hat{\Psi}^\dagger_\alpha(0)|\Psi_0\rangle + \\
& + e^{-\frac{i}{\hbar}\vec{P}_n\cdot(\vec{x}-\vec{x'})}\langle\Psi_0|\hat{\Psi}^\dagger_\alpha(0)|n,\vec{P}_n\rangle\langle n,\vec{P}_n|\hat{\Psi}_\alpha(0)|\Psi_0\rangle\Big] = \\
= {} & \frac{1}{2s+1}\sum_{n,\vec{P}_n}\Big[e^{\frac{i}{\hbar}\vec{P}_n\cdot(\vec{x}-\vec{x'})}|\langle n,\vec{P}_n|\hat{\Psi}^\dagger_\alpha(0)|\Psi_0\rangle|^2 + \\
& + e^{-\frac{i}{\hbar}\vec{P}_n\cdot(\vec{x}-\vec{x'})}\,|\langle n,\vec{P}_n|\hat{\Psi}_\alpha(0)|\Psi_0\rangle|^2\Big]\,.
\end{aligned}$$

Moltiplichiamo ora per $e^{-i\vec{k}\cdot(\vec{x}-\vec{x'})}$ e integriamo su $(\vec{x}-\vec{x'})$. Si ottiene l'equazione:

$$\frac{V}{2s+1}\sum_n\left\{|\langle n,\vec{k}|\hat{\Psi}^\dagger_\alpha(0)|\Psi_0\rangle|^2 + |\langle n,-\vec{k}|\hat{\Psi}_\alpha(0)|\Psi_0\rangle|^2\right\} = 1 \qquad (2.135)$$

2.12.8 Comportamento asintotico della funzione di Green

Dalla rappresentazione spettrale per la funzione di Green

$$G(\vec{k},\omega) = \int_{\mu/\hbar}^{\infty} d\omega'\frac{A(\vec{k},\omega')}{\omega-\omega'+i\eta} + \int_{-\infty}^{\mu/\hbar} d\omega'\frac{B(\vec{k},\omega')}{\omega-\omega'-i\eta} \qquad (2.136)$$

si può effettuare il limite per $\omega\to\infty$ ottenendo:

$$\begin{aligned}
G(\vec{k},\omega) &= G^R(\vec{k},\omega) = G^A(\vec{k},\omega) \\
&\sim \frac{1}{\omega}\left(\int_{\mu/\hbar}^{\infty} d\omega' A(\vec{k},\omega') + \int_{-\infty}^{\mu/\hbar} d\omega' B(\vec{k},\omega')\right) = \\
&\sim \frac{1}{\omega}\int_{-\infty}^{\infty} d\omega'\left[A(\vec{k},\omega') + B(\vec{k},\omega')\right] \qquad (2.137)
\end{aligned}$$

Utilizziamo ora le espressioni (2.121) e (2.122) delle funzioni spettrali; ne segue:

$$
\begin{aligned}
& G(\vec{k},\omega) = G^R(\vec{k},\omega) = G^A(\vec{k},\omega) \qquad (2.138)\\
& \sim \frac{1}{\omega}\frac{V}{2s+1}\sum_n \left\{ |\langle n,\vec{k}|\hat{\Psi}^\dagger_\alpha(0)|\Psi_0\rangle|^2 + |\langle n,-\vec{k}|\hat{\Psi}_\alpha(0)|\Psi_0\rangle|^2 \right\} \sim \frac{1}{\omega}
\end{aligned}
$$

dove l'ultimo passaggio discende dalla "regola di somma" (2.135) esaminata in precedenza. Notiamo anche che nel denominatore è lecito trascurare ω' rispetto a ω anche se almeno uno dei limiti di integrazione è infinito, poichè il supporto delle funzioni spettrali (regione in cui esse sono significativamente diverse da zero) è comunque finito.

Nota La relazione (2.138) giustifica a posteriori l'aver trascurato il contributo del semicerchio all'infinito superiore (o inferiore) nella deduzione della relazione di dispersione per $G^R(\vec{k},\omega)$ [ovvero per $G^A(\vec{k},\omega)$].

2.13 Interpretazione fisica della funzione di Green

Si consideri lo stato di un sistema, $|\Psi_I(t')\rangle$, in descrizione di interazione e si aggiunga una particella *nel punto* $\vec{x'}$ *all'istante* t':

$$\hat{\Psi}^\dagger_{I\beta}(\vec{x'}t')|\Psi_I(t')\rangle.$$

Come già si è osservato altrove, in generale questo stato non sarà un autostato dell'Hamiltoniana; quindi si propaga nel tempo secondo la legge di evoluzione temporale:

$$\hat{U}(t,t')\hat{\Psi}^\dagger_{I\beta}(\vec{x'}t')|\Psi_I(t')\rangle.$$

Possiamo allora chiederci qual'è la sovrapposizione di questo stato, per $t > t'$, con lo stato $\hat{\Psi}^\dagger_{I\alpha}(\vec{x}t)|\Psi_I(t)\rangle$, ovvero quanto troviamo dello stato iniziale in quest'ultimo stato. Ricordando che $\hat{O}_I(t) = \hat{U}(t,0)\hat{O}_H(t)\hat{U}(0,t)$, avremo:

$$
\begin{aligned}
& \langle\Psi_I(t)|\hat{\Psi}_{I\alpha}(\vec{x}t)\hat{U}(t,t')\hat{\Psi}^\dagger_{I\beta}(\vec{x'}t')|\Psi_I(t')\rangle = \\
& = \langle\Phi_0|\hat{U}^\dagger(t,\infty)\left[\hat{U}(t,0)\hat{\Psi}_{H\alpha}(\vec{x}t)\hat{U}(0,t)\right]\times \\
& \times\hat{U}(t,t')\left[\hat{U}(t',0)\hat{\Psi}^\dagger_{H\beta}(\vec{x'}t')\hat{U}(0,t')\right]\hat{U}(t',-\infty)|\Phi_0\rangle = \\
& = \langle\Phi_0|\hat{U}(\infty,0)\hat{\Psi}_{H\alpha}(\vec{x}t)\hat{\Psi}^\dagger_{H\beta}(\vec{x'}t')\hat{U}(0,-\infty)|\Phi_0\rangle = \\
& = \langle\Psi_0|\hat{\Psi}_{H\alpha}(\vec{x}t)\hat{\Psi}^\dagger_{H\beta}(\vec{x'}t')|\Psi_0\rangle, \qquad (2.139)
\end{aligned}
$$

che è la funzione di Green per $t > t'$. *Essa descrive pertanto la propagazione di uno stato che contiene una particella in più.* Si noti che nella derivazione precedente si è assunto che $|\Psi_I(t')\rangle$ si sviluppi adiabaticamente dallo stato fondamentale non interagente $|\Phi_0\rangle$.

Aggiungiamo ora al sistema un *buco* all'istante t (ovvero distruggiamo una particella):

$$\hat{\Psi}_{I\alpha}(\vec{x}t)|\Psi_I(t)\rangle$$

che si propagherà nel tempo secondo la legge

$$\hat{U}(t',t)\hat{\Psi}_{I\alpha}(\vec{x}t)|\Psi_I(t)\rangle.$$

Anche in questo caso possiamo determinare qual'è la sovrapposizione di questo stato con $\hat{\Psi}_{I\beta}(\vec{x}'t')|\Psi_I(t')\rangle$ ad un istante $t' > t$:

$$\begin{aligned}
&\langle\Psi_I(t')|\hat{\Psi}^\dagger_{I\beta}(\vec{x}'t')\hat{U}(t',t)\hat{\Psi}_{I\alpha}(\vec{x}t)|\Psi_I(t)\rangle = \\
&= \langle\Phi_0|\hat{U}^\dagger(t',\infty)\left[\hat{U}(t',0)\hat{\Psi}^\dagger_{H\beta}(\vec{x}'t')\hat{U}(0,t')\right]\times \\
&\times\hat{U}(t',t)\left[\hat{U}(t,0)\hat{\Psi}_{H\alpha}(\vec{x}t)\hat{U}(0,t)\right]\hat{U}(t,-\infty)|\Phi_0\rangle = \\
&\quad= \langle\Phi_0|\hat{U}(\infty,0)\hat{\Psi}^\dagger_{H\beta}(\vec{x}'t')\hat{\Psi}_{H\alpha}(\vec{x}t)\hat{U}(0,-\infty)|\Phi_0\rangle = \\
&\quad\quad= \langle\Psi_0|\hat{\Psi}^\dagger_{H\beta}(\vec{x}'t')\hat{\Psi}_{H\alpha}(\vec{x}t)|\Psi_0\rangle,
\end{aligned} \tag{2.140}$$

che è la funzione di Green per $t' > t$: *essa descrive la propagazione di uno stato che contiene una particella in meno (propagazione di un buco).* Notiamo che questi buchi si possono interpretare come particelle che si propagano all'indietro nel tempo (da t' a t).

L'ampiezza di probabilità (per unità di volume) di trovare ad un tempo $t(t')$ successivo a $t'(t)$ una particella (un buco) nello stato del sistema interagente è data dalla funzione di Green di particella singola.

2.13.1 Studio della propagazione nel tempo di una particella

Consideriamo la funzione di Green nella rappresentazione mista:

$$\begin{aligned}
G(\vec{k},t) &= \int_{-\infty}^{\infty}\frac{d\omega}{2\pi}e^{-i\omega t}G(\vec{k},\omega) = \\
&= \int_{-\infty}^{\mu/\hbar}\frac{d\omega}{2\pi}e^{-i\omega t}G(\vec{k},\omega) + \int_{\mu/\hbar}^{\infty}\frac{d\omega}{2\pi}e^{-i\omega t}G(\vec{k},\omega) = \\
&= \int_{-\infty}^{\mu/\hbar}\frac{d\omega}{2\pi}e^{-i\omega t}G^A(\vec{k},\omega) + \int_{\mu/\hbar}^{\infty}\frac{d\omega}{2\pi}e^{-i\omega t}G^R(\vec{k},\omega)\,.
\end{aligned} \tag{2.141}$$

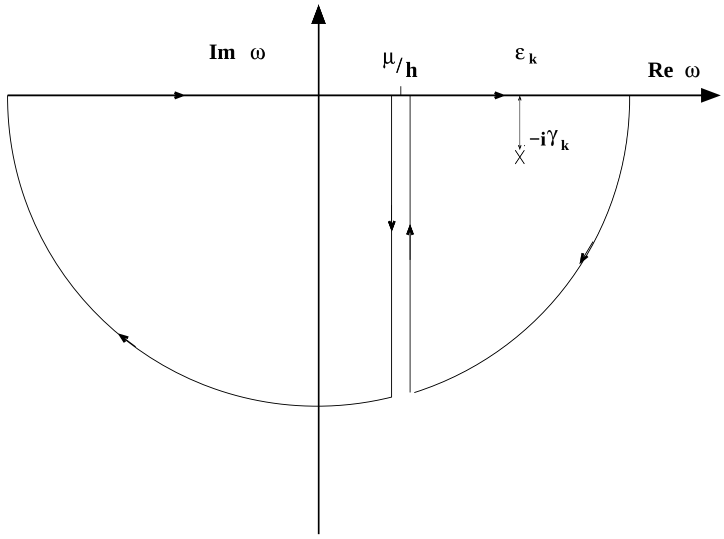


Figura 2.7: Cammino di integrazione per G^R.

Assumiamo ora, a titolo di esempio, il seguente modello per $G^R(\vec{k},\omega)$ (che deve presentare almeno una singolarità nel semipiano Im $\omega < 0$):

$$G^R(\vec{k},\omega) \simeq \frac{a}{\omega - \epsilon_k/\hbar + i\gamma_k} \tag{2.142}$$

dove a è un parametro senza dimensioni e la funzione presenta un polo semplice in $\omega = \epsilon_k/\hbar - i\gamma_k$ con residuo "a".

Nota Secondo la teoria generale la parte immaginaria del polo, γ_k, dovrebbe essere infinitesima: ciò corrisponderebbe ad uno stato eccitato "stazionario" del sistema; tuttavia sperimentalmente sappiamo che gli stati eccitati dei sistemi a molticorpi decadono e γ_k sarà legata all'ampiezza di probabilità di tale decadimento (larghezza dello stato).

Non faremo invece ipotesi specifiche su G^A, tranne ricordare che per definizione essa è analitica regolare nel semipiano Im $\omega < 0$ e che, sull'asse reale, essa coincide con G^{R^*}.

Oltre alla condizione $\epsilon > \mu$ richiediamo anche, per la validità della (2.142), che:

$$\epsilon_k - \mu \ll \hbar\gamma_k > 0\,.$$

Chiudendo il cammino di integrazione come in figura (2.7) (e tenendo conto che il contributo dell'arco di cerchio all'infinito (Γ) è nullo) si avrà:

$$
\begin{aligned}
&\oint \frac{d\omega}{2\pi} e^{-i\omega t} G^R(\vec{k},\omega) = \\
&= \int_{\mu/\hbar}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} e^{-i\omega t} G^R(\vec{k},\omega) + \int_{\Gamma} \frac{d\omega}{2\pi} e^{-i\omega t} G^R(\vec{k},\omega) + \\
&\quad + \int_{\mu/\hbar - i\infty}^{\mu/\hbar} \frac{d\omega}{2\pi} e^{-i\omega t} G^R(\vec{k},\omega) = -iae^{-i\epsilon_k t/\hbar} e^{-\gamma_k t}
\end{aligned}
$$

Otteniamo così la relazione:

$$
\begin{aligned}
&\int_{\mu/\hbar}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} e^{-i\omega t} G^R(\vec{k},\omega) = \\
&= \int_{\mu/\hbar}^{\mu/\hbar - i\infty} \frac{d\omega}{2\pi} e^{-i\omega t} G^R(\vec{k},\omega) - iae^{-i\epsilon_k t/\hbar} e^{-\gamma_k t}
\end{aligned}
\tag{2.143}
$$

Analogamente, chiudendo lungo il cammino di integrazione di sinistra nella figura 2.7 e ricordando che G^A è analitica regolare per Im $\omega < 0$, scriveremo:

$$
\int_{-\infty}^{\mu/\hbar} \frac{d\omega}{2\pi} e^{-i\omega t} G^A(\vec{k},\omega) = \int_{\mu/\hbar - i\infty}^{\mu/\hbar} \frac{d\omega}{2\pi} e^{-i\omega t} G^A(\vec{k},\omega)\,. \tag{2.144}
$$

Inseriamo ora le relazioni (2.143) e (2.144) nella (2.141) e otteniamo la seguente espressione per la funzione di Green in rappresentazione mista:

$$
G(\vec{k},t) = \int_{\mu/\hbar - i\infty}^{\mu/\hbar} \frac{d\omega}{2\pi} e^{-i\omega t} \left[G^A(\vec{k},\omega) - G^R(\vec{k},\omega) \right] - iae^{-i\epsilon_k t/\hbar} e^{-\gamma_k t} \tag{2.145}
$$

e, qualora si possa trascurare il contributo dell'integrale,

$$
G(\vec{k},t) \simeq -iae^{-i\epsilon_k t/\hbar} e^{-\gamma_k t} \tag{2.146}
$$

L'integrale nell'equazione (2.145) si può effettivamente trascurare se sono soddisfatte le seguenti condizioni:

- $|t|(\epsilon_k - \mu) \gg \hbar$
- $|t|\gamma_k \leq 1$

quindi l'intervallo di tempo in cui "vive" la particella descritta dalla (2.141) [ovvero (2.146)] non deve essere né troppo grande né troppo piccolo.

Notiamo infatti che per ω reale vale la relazione:

$$
G^A(\vec{k},\omega) = \left[G^R(\vec{k},\omega) \right]^* \simeq \frac{a}{\omega - \epsilon_k/\hbar + i\gamma_k}. \tag{2.147}
$$

Ora, poiché l'integrale nella (2.145) riceve il massimo contributo dalla zona prossima all'asse reale (per grandi valori di Im ω l'integrando decresce esponenzialmente), potremo scrivere:

$$\begin{aligned} I \equiv & \int_{\mu/\hbar - i\infty}^{\mu/\hbar} \frac{d\omega}{2\pi} e^{-i\omega t} \left[G^A(\vec{k},\omega) - G^R(\vec{k},\omega) \right] \simeq \\ & \simeq 2i\gamma_k a \int_{\mu/\hbar - i\infty}^{\mu/\hbar} \frac{d\omega}{2\pi} \frac{e^{-i\omega t}}{\left(\omega - \frac{\epsilon_k}{\hbar}\right)^2 + \gamma_k^2}. \end{aligned} \tag{2.148}$$

Poniamo ora $u = i(\omega - \mu/\hbar)$:

$$\begin{aligned} I = & -\frac{\gamma_k a}{\pi} e^{-i\mu t/\hbar} \int_0^\infty du \frac{e^{-ut}}{\left[\frac{\mu - \epsilon_k}{\hbar} - iu\right]^2 + \gamma_k^2} = \\ = & -\frac{\gamma_k a}{\pi t} e^{-i\mu t/\hbar} \int_0^\infty dx \frac{e^{-x}}{\left[\frac{\epsilon_k - \mu}{\hbar} + i\frac{x}{t}\right]^2 + \gamma_k^2} = \\ = & -\frac{\gamma_k a}{\pi t} e^{-i\mu t/\hbar} t^2 \int_0^\infty dx \frac{e^{-x}}{\left[\frac{(\epsilon_k - \mu)t}{\hbar} + ix\right]^2 + \gamma_k^2 t^2} \simeq \\ \simeq & -\frac{\gamma_k a}{\pi t} e^{-i\mu t/\hbar} \frac{\hbar^2}{(\epsilon_k - \mu)^2} \int_0^\infty dx\, e^{-x} = \\ = & -\frac{a}{\pi} \gamma_k t \frac{\hbar^2}{(\epsilon_k - \mu)^2 t^2} e^{-i\mu t/\hbar} \ll -ia e^{-i\epsilon_k t/\hbar} e^{-\gamma_k t}, \end{aligned}$$

che dimostra l'assunto.

Capitolo 3

Teoria Perturbativa

3.1 Sviluppo del valor medio di operatori

Le relazioni che seguono sono di primaria importanza per poter introdurre i metodi della teoria perturbativa nel calcolo delle funzioni di Green e di quantità ad esse collegate.

3.1.1 Valor medio di un operatore

Secondo il teorema di Gell-Mann e Low, se esiste il

$$\lim_{\epsilon\to 0}\frac{\hat{U}_\epsilon(0,\pm\infty)|\phi_0\rangle}{\langle\phi_0|\hat{U}_\epsilon(0,\pm\infty)|\phi_0\rangle}=\frac{|\Psi_0\rangle}{\langle\phi_0|\Psi_0\rangle} \tag{3.1}$$

allora esso é *autostato dell' Hamiltoniana*; in particolare cooinciderà con lo stato fondamentale esatto se $|\phi_0\rangle$ è il corrispondente stato imperturbato.

Si vuole ora valutare nello stato (3.1) il valor medio di un operatore $\hat{O}_H(t)$. Avremo:

$$\frac{\langle\Psi_0|\hat{O}_H(t)|\Psi_0\rangle/|\langle\phi_0|\Psi_0\rangle|^2}{\langle\Psi_0|\Psi_0\rangle/|\langle\phi_0|\Psi_0\rangle|^2}=\frac{\langle\Psi_0|\hat{O}_H(t)|\Psi_0\rangle}{\langle\Psi_0|\Psi_0\rangle}$$

Consideriamo il denominatore (per fissato ϵ, poi si farà il limite per $\epsilon\to 0$):

$$\begin{aligned}\langle\Psi_0|\Psi_0\rangle &= \langle\phi_0|\hat{U}_\epsilon^\dagger(0,\infty)\hat{U}_\epsilon(0,-\infty)|\phi_0\rangle = \\ &= \langle\phi_0|\hat{U}_\epsilon(\infty,0)\hat{U}_\epsilon(0,-\infty)|\phi_0\rangle = \langle\phi_0|\hat{U}_\epsilon(\infty,-\infty)|\phi_0\rangle = \\ &= \langle\phi_0|\hat{S}_\epsilon|\phi_0\rangle, \end{aligned} \tag{3.2}$$

dove si è introdotta la definizione di *matrice* $\hat{S}$:

$$\hat{S}=\lim_{t\to\infty,t'\to-\infty}U(t,t')$$

e dove il parametro ϵ si riferisce al processo di accensione adiabatica dell'interazione, eventualmente eliminabile nel limite $\epsilon \to 0$.

Per il numeratore, tenendo anche conto della relazione tra operatori in descrizione di Heisenberg e di Interazione, possiamo scrivere:

$$\begin{aligned}\langle\Psi_0|\hat{O}_H(t)|\Psi_0\rangle &= \langle\phi_0|\hat{U}_\epsilon(\infty,0)\hat{U}_\epsilon(0,t)\hat{O}_I(t)\hat{U}_\epsilon(t,0)\hat{U}_\epsilon(0,-\infty)|\phi_0\rangle = \\ &= \langle\phi_0|\hat{U}_\epsilon(\infty,t)\hat{O}_I(t)\hat{U}_\epsilon(t,-\infty)|\phi_0\rangle \qquad (3.3)\end{aligned}$$

Facendo infine il rapporto fra la (3.2) e la (3.3) otteniamo

$$\frac{\langle\Psi_0|\hat{O}_H(t)|\Psi_0\rangle}{\langle\Psi_0|\Psi_0\rangle} = \frac{\langle\phi_0|\hat{U}_\epsilon(\infty,t)\hat{O}_I(t)\hat{U}_\epsilon(t,-\infty)|\phi_0\rangle}{\langle\phi_0|\hat{S}_\epsilon|\phi_0\rangle} .$$

Si è visto precedentemente che l'operatore di evoluzione temporale si esprime attraverso una serie perturbativa:

$$\hat{U}(t,t_0) = \sum_{n=0}^{\infty}\left(-\frac{i}{\hbar}\right)^n \frac{1}{n!}\int_{t_0}^{t} dt_1 \dots \int_{t_0}^{t} dt_n T\left(\hat{H}_1(t_1)\dots\hat{H}_1(t_n)\right) .$$

Pertanto

$$\begin{aligned}\frac{\langle\Psi_0|\hat{O}_H(t)|\Psi_0\rangle}{\langle\Psi_0|\Psi_0\rangle} &= \frac{1}{\langle\phi_0|\hat{S}_\epsilon|\phi_0\rangle}\langle\phi_0|\sum_{n=0}^{\infty}\left(-\frac{i}{\hbar}\right)^n \frac{1}{n!} \times \\ &\times \int_t^{\infty} dt_1 . \int_t^{\infty} dt_n e^{-\epsilon(|t_1|+..+|t_n|)} T\Big(\hat{H}_1(t_1)..\hat{H}_1(t_n)\Big)\hat{O}_I(t) \times \\ &\times \sum_{m=0}^{\infty}\left(-\frac{i}{\hbar}\right)^m \frac{1}{m!}\int_{-\infty}^{t} dt'_1 \dots \int_{-\infty}^{t} dt'_m e^{-\epsilon(|t'_1|+\dots+|t'_n|)} \times \\ &\times T\left(\hat{H}_1(t'_1)\dots\hat{H}_1(t'_n)\right)|\phi_0\rangle = \\ &= \frac{1}{\langle\phi_0|\hat{S}_\epsilon|\phi_0\rangle}\sum_{\nu=0}^{\infty}\left(-\frac{i}{\hbar}\right)^\nu \frac{1}{\nu!}\sum_{n=0}^{\infty}\sum_{m=0}^{\infty}\frac{\nu!}{n!m!}\delta_{\nu,n+m} \times \\ &\times \langle\phi_0|\int_t^{\infty} dt_1 .. \int_t^{\infty} dt_n e^{-\epsilon(|t_1|+..+|t_n|)} T\left(\hat{H}_1(t_1)..\hat{H}_1(t_n)\right)\hat{O}_I(t) \times \\ &\times \int_{-\infty}^{t} dt'_1 \dots \int_{-\infty}^{t} dt'_m e^{-\epsilon(|t'_1|+..+|t'_n|)} T\left(\hat{H}_1(t'_1)\dots\hat{H}_1(t'_m)\right)|\phi_0\rangle\end{aligned}$$

che, *e questo é il punto importante*, si puó scrivere come:

$$\begin{aligned}\frac{\langle\Psi_0|\hat{O}_H(t)|\Psi_0\rangle}{\langle\Psi_0|\Psi_0\rangle} &= \frac{1}{\langle\phi_0|\hat{S}_\epsilon|\phi_0\rangle}\sum_{\nu=0}^{\infty}\left(-\frac{i}{\hbar}\right)^\nu \frac{1}{\nu!} \times \qquad (3.4) \\ &\times \int_{-\infty}^{\infty} dt_1 .. \int_{-\infty}^{\infty} dt_\nu e^{-\epsilon(|t_1|+..+|t_\nu|)}\langle\phi_0|T\left\{\hat{H}_1(t_1)..\hat{H}_1(t_\nu)\hat{O}_I(t)\right\}|\phi_0\rangle .\end{aligned}$$

Infatti in quest'ultima relazione il tempo t costituisce un punto di riferimento fisso. I ν tempi $t_1, t_2 \ldots t_\nu$ possono essere o tutti maggiori o tutti minori o in parte maggiori e in parte minori di t. In generale si verificherá quest'ultimo caso. Consideriamo allora il $\nu^{\underline{mo}}$ termine perturbativo e effettuiamo la partizione:

$$\begin{array}{lll} n & \text{fattori} & \text{con } t_i > t \\ m & \text{fattori} & \text{con } t_i < t \end{array} \qquad \text{essendo} \quad m + n = \nu \ .$$

In questo modo il time–ordering si spezzerá nel prodotto di due prodotti cronologici, tenendo presente che le $\hat{H}_1$ commutano fra di loro e $\hat{O}_I(t)$ commuta con qualunque $\hat{H}_1$ *dentro il time-ordering.*

In quanti modi si puó effettuare la partizione di ν oggetti in due classi di n ed m oggetti rispettivamente? La risposta è data dal binomiale

$$\begin{pmatrix} \nu \\ n \end{pmatrix} = \frac{\nu!}{n!m!} \qquad \text{modi diversi.}$$

Bisogna ovviamente considerarli tutti ed é facile convincersi che *tutti danno il medesimo contributo.* É altresí chiaro che per esaurire completamente il dominio di integrazione dell' integrale multiplo sui tempi $t_1, t_2..t_\nu$ dovremo sommare su m e su n consistentemente con la condizione $m+n = \nu$. Formalmente possiamo far variare m e n fra 0 ed ∞, a patto di introdurre un simbolo di Kronecker $\delta_{\nu,n+m}$.

Abbiamo cosí dimostrato la validità della relazione (3.4).

3.1.2 Valor medio del prodotto cronologico di due operatori

In modo analogo a quanto visto sopra si dimostra che:

$$\begin{aligned} &\frac{\langle \Psi_0 | T\left(\hat{O}_H(t)\hat{O}_H(t')\right)|\Psi_0\rangle}{\langle \Psi_0|\Psi_0\rangle} = \\ &= \frac{1}{\langle \phi_0|\hat{S}_\epsilon|\phi_0\rangle} \sum_{\nu=0}^{\infty} \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^\nu \frac{1}{\nu!} \int_{-\infty}^{\infty} dt_1 \int_{-\infty}^{\infty} dt_2 \ldots \\ &\times \int_{-\infty}^{\infty} dt_\nu e^{-\epsilon(|t_1|+..+|t_\nu|)} \langle \phi_0 | T\left\{\hat{H}_1(t_1)\ldots\hat{H}_1(t_\nu)\hat{O}_I(t)\hat{O}_I(t')\right\}|\phi_0\rangle \ . \end{aligned} \tag{3.5}$$

Per dimostrare questa importante relazione, si considerino separatamente i casi in cui $t > t'$ e $t' > t$. Nel primo caso scriveremo:

$$\langle \Psi_0 | T\left(\hat{O}_H(t)\hat{O}_H(t')\right)|\Psi_0\rangle =$$

$$
\begin{aligned}
&= \langle\phi_0|\hat{U}_\epsilon(\infty,0)\left[\hat{U}_\epsilon(0,t)\hat{O}_I(t)\hat{U}_\epsilon(t,0)\right]\times\\
&\times\left[\hat{U}_\epsilon(0,t')\hat{O}_I(t')\hat{U}_\epsilon(t',0)\right]\hat{U}_\epsilon(0,-\infty)|\phi_0\rangle =\\
&= \langle\phi_0|\hat{U}_\epsilon(\infty,t)\hat{O}_I(t)\hat{U}_\epsilon(t,t')\hat{O}_I(t')\hat{U}_\epsilon(t',-\infty)|\phi_0\rangle
\end{aligned}
$$

dopodichè la dimostrazione procede in modo analogo alla precedente, salvo il fatto che occorre considerare raggruppamenti delle $H_1(t)$ in tre gruppi diversi, a seconda che, per es., $t_1 > t_2... > t > t'_1 > t_2, ... > t' > t''_1 > t''_2 > ....$ Lo stesso ragionamento vale per $t' > t$.

Notiamo esplicitamente che, poiché le relazioni (3.4) e (3.5) consistono di rapporti, i termini divergenti si cancellano: si puó pertanto prendere il limite per $\epsilon \to 0$. Questo punto verrá ulteriormente dimostrato piú avanti.

É da sottolineare che la (3.4) e (3.5) sono tra i piú utili risultati della teoria quantistica dei campi; quando si sia effettuato il limite per $\epsilon \to 0$, esse assumono la forma generale:

$$
\begin{aligned}
&\frac{\langle\Psi_0|\hat{O}_H(t)|\Psi_0\rangle}{\langle\Psi_0|\Psi_0\rangle} = \\
&= \frac{1}{\langle\phi_0|\hat{S}|\phi_0\rangle}\sum_{\nu=0}^{\infty}\left(-\frac{i}{\hbar}\right)^{\nu}\frac{1}{\nu!}\int_{-\infty}^{\infty}dt_1 l\int_{-\infty}^{\infty}dt_\nu\times\\
&\times\langle\phi_0|T\left(\hat{H}_1(t_1)\dots\hat{H}_1(t_\nu)\hat{O}_I(t)\right)|\phi_0\rangle
\end{aligned}
\tag{3.6}
$$

$$
\begin{aligned}
&\frac{\langle\Psi_0|T\left\{\hat{O}_H(t)\hat{O}_H(t')\right\}|\Psi_0\rangle}{\langle\Psi_0|\Psi_0\rangle} = \\
&= \frac{1}{\langle\phi_0|\hat{S}|\phi_0\rangle}\sum_{\nu=0}^{\infty}\left(-\frac{i}{\hbar}\right)^{\nu}\frac{1}{\nu!}\int_{-\infty}^{\infty}dt_1\dots\int_{-\infty}^{\infty}dt_\nu\times\\
&\times\langle\phi_0|T\left(\hat{H}_1(t_1)..\hat{H}_1(t_\nu)\hat{O}_I(t)\hat{O}_I(t')\right)|\phi_0\rangle
\end{aligned}
\tag{3.7}
$$

dove $\hat{S} = \hat{U}(\infty, -\infty)$.

3.2 Funzione di Green libera nello spazio e nel tempo

Sebbene questo argomento sia già stato trattato estesamente, conviene qui ricordarne alcuni aspetti che saranno utili nel calcolo di contrazioni di operatori di campo (vedi paragrafo successivo).

Il propagatore libero é:

$$iG^0_{\alpha\beta}(\vec{x}t,\vec{x'}t') = \langle\phi_0|T\left(\hat{\Psi}_{H_\alpha}(\vec{x},t)\hat{\Psi}^\dagger_{H_\beta}(\vec{x'},t')\right)|\phi_0\rangle$$

Da questa definizione si è ottenuto, nello spazio degli impulsi:

$$G^0_{\alpha\beta}(|\vec{k}|,\omega) = \delta_{\alpha\beta}\left[\frac{\theta(k-k_F)}{\omega-\omega_k+i\eta}+\frac{\theta(k_F-k)}{\omega-\omega_k-i\eta}\right],$$

da cui si può ottenere una forma esplicita di $G^0_{\alpha\beta}(\vec{x}t,\vec{x'}t')$ nello spazio delle coordinate mediante una trasformata di Fourier:

$$\begin{aligned} G^0_{\alpha\beta}(\vec{x}-\vec{x'},t-t') &= \frac{1}{(2\pi)^4}\int d\vec{k}\int_{-\infty}^{\infty} d\omega e^{i\vec{k}\cdot(\vec{x}-\vec{x'})}e^{-i\omega(t-t')}\times \\ &\times\delta_{\alpha\beta}\left[\frac{\theta(k-k_F)}{\omega-\omega_k+i\eta}+\frac{\theta(k_F-k)}{\omega-\omega_k-i\eta}\right]. \end{aligned}$$

I°) $t-t'>0$
si chiude l'integrazione sulla frequenza nel *semipiano inferiore* del piano complesso di ω, per cui

$$\begin{aligned} G^0_{\alpha\beta}(\vec{x}-\vec{x'},t-t') &= -\frac{1}{(2\pi)^4}\int d\vec{k}e^{i\vec{k}\cdot(\vec{x}-\vec{x'})}\theta(k-k_F)e^{-i\omega_k(t-t')}2\pi i\delta_{\alpha\beta} = \\ &= -\frac{i}{V}\sum_{k>k_F} e^{i\vec{k}\cdot(\vec{x}-\vec{x'})}e^{-i\omega_k(t-t')}\delta_{\alpha\beta} \end{aligned}$$

quindi

$$iG^0_{\alpha\beta}(\vec{x}-\vec{x'},t-t')\theta(t-t') = \frac{\delta_{\alpha\beta}}{V}\sum_{k>k_F} e^{i\vec{k}\cdot(\vec{x}-\vec{x'})}e^{-i\omega_k(t-t')} \tag{3.8}$$

II°) $t-t'<0$
si chiude l'integrazione sulla frequenza nel *semipiano superiore* del piano complesso di ω, per cui

$$\begin{aligned} G^0_{\alpha\beta}(\vec{x}-\vec{x'},t-t') &= \frac{1}{(2\pi)^4}\int d\vec{k}e^{i\vec{k}\cdot(\vec{x}-\vec{x'})}\theta(k_F-k)e^{i\omega_k(t'-t)}2\pi i\delta_{\alpha\beta} = \\ &= \frac{i}{V}\sum_{k<k_F} e^{i\vec{k}\cdot(\vec{x}-\vec{x'})}e^{i\omega_k(t'-t)}\delta_{\alpha\beta} \end{aligned}$$

e quindi

$$iG^0_{\alpha\beta}(\vec{x}-\vec{x'},t-t')\theta(t'-t) = -\frac{\delta_{\alpha\beta}}{V}\sum_{k<k_F} e^{i\vec{k}\cdot(\vec{x}-\vec{x'})}e^{-i\omega_k(t'-t)} \tag{3.9}$$

3.3 Teorema di Wick

Per introdurre l'enunciato del teorema di Wick occorre definire alcune "manipolazioni" di operatori (generici) in seconda quantizzazione:

- **Componenti di creazione e distruzione** in un operatore di campo.

  Consideriamo un operatore di campo (fermionico) e separiamolo nelle sue parti di *distruzione* $\hat{\Psi}^{+}(x)$ e di *creazione* $\hat{\Psi}^{(-)}(x)$:

$$\begin{aligned}
\hat{\Psi}(x) \quad &= \hat{\Psi}^{(+)}(x) + \hat{\Psi}^{(-)}(x) \\
\hat{\Psi}^{\dagger}(x) \quad &= \hat{\Psi}^{\dagger(+)}(x) + \hat{\Psi}^{\dagger(-)}(x)
\end{aligned}$$

  Per definizione, le componenti distruttive sono quelle che annichilano il "vuoto", ossia lo stato fondamentale del sistema non interagente (gas di fermioni liberi), che, giova ricordare, non contiene né particelle né buchi:

$$\hat{\Psi}^{(+)}(x)|\phi_0\rangle = 0\,, \qquad \hat{\Psi}^{\dagger(-)}(x)|\phi_0\rangle = 0 \quad .$$

  Si tratta dunque di separare i campi nella parte distruttiva, che annichila lo stato fondamentale non interagente, e nella parte creativa.

  A tal fine consideriamo la forma esplicita (nella descrizione di interazione) di un operatore di campo fermionico:

$$\begin{aligned}
\hat{\Psi}(x) \quad &= \frac{1}{\sqrt{V}}\sum_{k,\lambda} e^{i(\vec{k}\cdot\vec{x}-\omega_k t)}\eta_\lambda \hat{c}_{\vec{k},\lambda} = \\
&= \frac{1}{\sqrt{V}}\sum_{k>k_F,\lambda} e^{i(\vec{k}\cdot\vec{x}-\omega_k t)}\eta_\lambda \hat{a}_{\vec{k},\lambda} + \\
&\quad + \frac{1}{\sqrt{V}}\sum_{k<k_F,\lambda} e^{i(\vec{k}\cdot\vec{x}-\omega_k t)}\eta_\lambda (-1)^{1/2-\lambda}\hat{b}^{\dagger}_{-\vec{k},-\lambda} \equiv \qquad (3.10) \\
&\equiv \hat{\Psi}^{(+)}(x) + \hat{\Psi}^{(-)}(x)\,. \qquad (3.11)
\end{aligned}$$

  Questo sviluppo ci consente di identificare in $\hat{\Psi}(x)$ la parte di distruzione (di particelle, fuori del mare di Fermi) e quella di creazione (di buchi, dentro il mare di Fermi).

  NB. poiché qui si considera il campo "completo", esso non ha indice di spin, quindi si somma su λ e si introduce lo spinore nello sviluppo.

- T-prodotto o **prodotto cronologico (alla Wick)** (giá visto)

$$T\left\{\hat{A}(t_1)\hat{B}(t_n)..\hat{C}(t_2)\right\} = (-1)^P \hat{A}(t_1)\hat{C}(t_2)..\hat{B}(t_n) \quad \text{per } t_1 > t_2..t_n \tag{3.12}$$

P è il numero di permutazioni dei campi fermionici necessario per ottenere il corretto ordinamento cronologico dei medesimi (non si genera, invece, alcuna fase per operatori bosonici o per scambi di un numero pari di operatori fermionici, per esempio di due Hamiltoniane di interazione).

- N-prodotto o **prodotto normale**

$$N(\hat{A}\hat{B}\hat{C}\hat{D}\ldots) = (-1)^P(\hat{C}\hat{A}\hat{D}\hat{B}\ldots) \tag{3.13}$$

in cui, a secondo membro della (3.13), gli operatori sono ordinati in modo tale che tutti gli operatori di distruzione siano situati alla destra degli operatori di creazione.

P è di nuovo il numero di permutazioni di operatori fermionici necessario per raggiungere l'ordinamento suddetto (non si aggiungono fasi per i bosoni).

Esempi di prodotto normale per operatori di campo fermionici:

$$N\left(\hat{\Psi}^{(+)}(x)\hat{\Psi}^{(-)}(y)\right) = -\hat{\Psi}^{(-)}(y)\hat{\Psi}^{(+)}(x)$$

$$N\left(\hat{\Psi}^{(+)}(x)\hat{\Psi}^{\dagger(+)}(y)\right) = -\hat{\Psi}^{\dagger(+)}(y)\hat{\Psi}^{(+)}(x)$$

Osservazioni

1. il valor medio del prodotto normale di operatori di campo nello stato fondamentale imperturbato $|\phi_0\rangle$ é identicamente nullo (infatti gli operatori di distruzione $\hat{\Psi}^{(+)}(x)$ e $\hat{\Psi}^{\dagger(-)}(y)$ danno risultato nullo se applicati a $|\phi_0\rangle$). Questo risultato permane vero anche se il prodotto consiste interamente di termini creativi, come risulta dalle equazioni aggiunte di quelle che definiscono le parti distruttive.

2. il T-prodotto e l'N-prodotto sono distributivi rispetto alla somma:

$$N\left[(\hat{A}+\hat{B})(\hat{C}+\hat{D})\dots\right] =$$
$$= N\left[\hat{A}\hat{C}\dots\right] + N\left[\hat{A}\hat{D}\dots\right] + N\left[\hat{B}\hat{C}\dots\right] + N\left[\hat{B}\hat{C}\dots\right]$$

e analogamente per il T-prodotto.

- **contrazioni**

La contrazione fra due operatori $\hat{U}$ e $\hat{V}$ si indica con $\hat{U}^\bullet\hat{V}^\bullet$ e viene definita come la differenza fra il loro prodotto cronologico e il loro prodotto normale:

$$\hat{U}^\bullet\hat{V}^\bullet \equiv T\left(\hat{U}\hat{V}\right) - N\left(\hat{U}\hat{V}\right) \tag{3.14}$$

La contrazione rappresenta il termine addizionale introdotto quando si riarrangia un T-product in un N-product e per questo motivo é diversa per diversi time–ordering degli operatori.

Possiamo subito osservare che la contrazione e' un c–number: infatti se T-prodotto ed N-prodotto coincidono, la loro differenza è nulla, se invece non coincidono, la loro differenza sarà, rispettivamente, l'anticommutatore (il commutatore) di operatori fermionici (bosonici) e, come tale, sarà ancora un c-number. Questo verrà mostrato con numerosi esempi espliciti: tuttavia, se si prende atto di questo fatto, possiamo definire la contrazione di due operatori come il valor medio sul "vuoto" del T-prodotto degli operatori stessi, infatti:

$$\begin{aligned}\langle\phi_0|\hat{U}^\bullet\hat{V}^\bullet|\phi_0\rangle &= \langle\phi_0|T\left(\hat{U}\hat{V}\right)|\phi_0\rangle - \langle\phi_0|N\left(\hat{U}\hat{V}\right)|\phi_0\rangle \equiv \\ &= \langle\phi_0|T\left(\hat{U}\hat{V}\right)|\phi_0\rangle \end{aligned} \tag{3.15}$$

essendo, per definizione, nullo il valor medio del prodotto normale.

3.3.1 Contrazioni di operatori di campo

Come si è visto nelle (3.10) e (3.11) gli operatori di campo e di campo aggiunto sono composti da una parte di creazione e una di distruzione. Esplicitamente abbiamo 4 tipi di campo:

$$\hat{\Psi}^{(+)}(x) = \frac{1}{\sqrt{V}}\sum_{k>k_F,\lambda} e^{i(\vec{k}\cdot\vec{x}-\omega_k t)}\eta_\lambda \hat{a}_{\vec{k},\lambda} \tag{3.16}$$

$$\hat{\Psi}^{(-)}(x) = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{k<k_F,\lambda} e^{i(\vec{k}\cdot\vec{x}-\omega_k t)} \eta_\lambda (-1)^{1/2-\lambda}\, \hat{b}^\dagger_{-\vec{k},-\lambda} \tag{3.17}$$

$$\hat{\Psi}^{\dagger(+)}(x) = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{k>k_F,\lambda} e^{-i(\vec{k}\cdot\vec{x}-\omega_k t)} \eta^\dagger_\lambda \hat{a}^\dagger_{\vec{k},\lambda} \tag{3.18}$$

$$\hat{\Psi}^{\dagger(-)}(x) = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{k<k_F,\lambda} e^{-i(\vec{k}\cdot\vec{x}-\omega_k t)} \eta^\dagger_\lambda (-1)^{1/2-\lambda}\, \hat{b}_{-\vec{k},-\lambda} \tag{3.19}$$

$$\tag{3.20}$$

e quindi 16 *contrazioni possibili.* Di queste 12 sono nulle, e solo 4 diverse da zero.

Infatti é facile verificare che

$$\hat{\Psi}^{(-)\bullet}\hat{\Psi}^{(-)\bullet} = \hat{\Psi}^{(-)\bullet}\hat{\Psi}^{(+)\bullet} = \hat{\Psi}^{(-)\bullet}\hat{\Psi}^{\dagger(+)\bullet} = 0$$

$$\hat{\Psi}^{(+)\bullet}\hat{\Psi}^{(-)\bullet} = \hat{\Psi}^{(+)\bullet}\hat{\Psi}^{(+)\bullet} = \hat{\Psi}^{(+)\bullet}\hat{\Psi}^{\dagger(-)\bullet} = 0$$

$$\hat{\Psi}^{\dagger(-)\bullet}\hat{\Psi}^{(+)\bullet} = \hat{\Psi}^{\dagger(-)\bullet}\hat{\Psi}^{\dagger(-)\bullet} = \hat{\Psi}^{\dagger(-)\bullet}\hat{\Psi}^{\dagger(+)\bullet} = 0$$

$$\hat{\Psi}^{\dagger(+)\bullet}\hat{\Psi}^{(-)\bullet} = \hat{\Psi}^{\dagger(+)\bullet}\hat{\Psi}^{\dagger(-)\bullet} = \hat{\Psi}^{\dagger(+)\bullet}\hat{\Psi}^{\dagger(+)\bullet} = 0$$

Vale l' utilissima proprietá

$$\hat{U}^\bullet \hat{V}^\bullet = \pm \hat{V}^\bullet \hat{U}^\bullet \begin{cases} + & \text{bosoni} \\ - & \text{fermioni} \end{cases}$$

la quale basta di per sé a mostrare che 4 contrazioni (*le 4 contrazioni di un campo con se stesso*) sono banalmente nulle.

- **La contrazione di un campo (di creazione o distruzione) con se stesso é nulla**

$$\begin{aligned} \hat{\Psi}^{(-)\bullet}(x)\hat{\Psi}^{(-)\bullet}(y) &= T\left(\hat{\Psi}^{(-)\bullet}(x)\hat{\Psi}^{(-)\bullet}(y)\right) - N\left(\hat{\Psi}^{(-)\bullet}(x)\hat{\Psi}^{(-)\bullet}(y)\right) = \\ &= \hat{\Psi}^{(-)}(x)\hat{\Psi}^{(-)}(y)\theta(t_x-t_y) \pm \hat{\Psi}^{(-)}(y)\hat{\Psi}^{(-)}(x)\theta(t_y-t_x) + \\ &- \left[\hat{\Psi}^{(-)}(x)\hat{\Psi}^{(-)}(y) - \hat{\Psi}^{(-)}(x)\hat{\Psi}^{(-)}(y)\right]\theta(t_y-t_x) \end{aligned}$$

a) fermioni

$$\begin{aligned} & \hat{\Psi}^{(-)\bullet}(x)\hat{\Psi}^{(-)\bullet}(y) = \\ & = -\hat{\Psi}^{(-)}(y)\hat{\Psi}^{(-)}(x)\theta(t_y-t_x) - \hat{\Psi}^{(-)}(x)\hat{\Psi}^{(-)}(y)\theta(t_y-t_x) = \\ = \quad & -\theta(t_y-t_x)\left\{\hat{\Psi}^{(-)}(y), \hat{\Psi}^{(-)}(x)\right\} = 0 \end{aligned}$$

b) bosoni

$$
\begin{aligned}
&\hat{\Psi}^{(-)\bullet}(x)\hat{\Psi}^{(-)\bullet}(y) = \\
&= \hat{\Psi}^{(-)}(y)\hat{\Psi}^{(-)}(x)\theta(t_y - t_x) - \hat{\Psi}^{(-)}(x)\hat{\Psi}^{(-)}(y)\theta(t_y - t_x) = \\
&= \theta(t_y - t_x)\left[\hat{\Psi}^{(-)}(y), \hat{\Psi}^{(-)}(x)\right] = 0
\end{aligned}
$$

dove in entrambi i casi la contrazione si annulla poiché sono nulli, rispettivamente, l'anticommutatore o il commutatore dei campi.

- **Contrazione delle parti di creazione e distruzione dello stesso tipo di campo**

  A titolo di esempio consideriamo:

$$
\hat{\Psi}^{(+)\bullet}(x)\hat{\Psi}^{(-)\bullet}(y) = T\left(\hat{\Psi}^{(+)}(x)\hat{\Psi}^{(-)}(y)\right) - N\left(\hat{\Psi}^{(+)}(x)\hat{\Psi}^{(-)}(y)\right)
$$

  Ora é

$$
T\left(\hat{\Psi}^{(+)}(x)\hat{\Psi}^{(-)}(y)\right) = \begin{cases} \hat{\Psi}^{(+)}(x)\hat{\Psi}^{(-)}(y) & t_x > t_y \\ \pm\hat{\Psi}^{(-)}(y)\hat{\Psi}^{(+)}(x) & t_y > t_x \end{cases} .
$$

$$
N\left(\hat{\Psi}^{(+)}(x)\hat{\Psi}^{(-)}(y)\right) = \pm\hat{\Psi}^{(-)}(y)\hat{\Psi}^{(+)}(x)
$$

  Quindi, per $t_x > t_y$,

$$
\begin{aligned}
\hat{\Psi}^{(+)\bullet}(x)\hat{\Psi}^{(-)\bullet}(y) \quad &= \hat{\Psi}^{(+)}(x)\hat{\Psi}^{(-)}(y) \mp \hat{\Psi}^{(-)}(y)\hat{\Psi}^{(+)}(x) = \\
&= \left[\hat{\Psi}^{(+)}(x)\hat{\Psi}^{(-)}(y)\right]_{\mp} = 0
\end{aligned}
$$

  mentre, per $t_y > t_x$,

$$
\hat{\Psi}^{(+)\bullet}(x)\hat{\Psi}^{(-)\bullet}(y) = \pm\hat{\Psi}^{(-)}(y)\hat{\Psi}^{(+)}(x) \mp \hat{\Psi}^{(-)}(y)\hat{\Psi}^{(+)}(x) = 0
$$

- **Contrazioni non nulle di campi *fermionici***

  Valutiamo ora le uniche contrazioni non nulle per *campi fermionici* con indice di spin definito:

$$
i) \qquad \hat{\Psi}_{\lambda}^{(+)\bullet}(x)\hat{\Psi}_{\lambda'}^{\dagger(+)\bullet}(y)
$$

Per $t_x > t_y$ abbiamo:

$$
\begin{aligned}
&\hat{\Psi}_{\lambda}^{(+)\bullet}(x)\hat{\Psi}_{\lambda'}^{\dagger(+)\bullet}(y) = \\
&= \frac{1}{V}\sum_{k,k'>k_F} e^{i\vec{k}\cdot\vec{x}}e^{-i\vec{k'}\cdot\vec{y}}e^{-i\omega_k t_x}e^{i\omega_{k'}t_y}\left(\hat{a}_{\vec{k}\lambda}\hat{a}^{\dagger}_{\vec{k'}\lambda'} + \hat{a}^{\dagger}_{\vec{k'}\lambda'}\hat{a}_{\vec{k}\lambda}\right) = \\
&= \frac{\delta_{\lambda\lambda'}}{V}\sum_{k,k'>k_F} \delta_{\vec{k}\vec{k'}}e^{i\vec{k}\cdot\vec{x}-i\omega_k t_x}e^{-i\vec{k'}\cdot\vec{y}+i\omega_{k'}t_y} = \\
&= \frac{\delta_{\lambda\lambda'}}{V}\sum_{k>k_F} e^{i\vec{k}\cdot(\vec{x}-\vec{y})}e^{-i\omega_k(t_x-t_y)} = iG^0_{\lambda\lambda'}(x,y)\theta(t_x-t_y)
\end{aligned}
$$

dove l'ultima eguaglianza discende dalla (3.8).

Invece per $t_y > t_x$ segue:

$$
\hat{\Psi}_{\lambda}^{(+)\bullet}(x)\hat{\Psi}_{\lambda'}^{\dagger(+)\bullet}(y) = \pm\hat{\Psi}_{\lambda'}^{\dagger(+)}(y)\hat{\Psi}_{\lambda}^{(+)}(x) \mp \hat{\Psi}_{\lambda'}^{\dagger(+)}(y)\hat{\Psi}_{\lambda}^{(+)}(x) = 0\ .
$$

ii) $\hat{\Psi}_{\lambda}^{(-)\bullet}(x)\hat{\Psi}_{\lambda'}^{\dagger(-)\bullet}(y)$

Per $t_x > t_y$ abbiamo:

$$
\begin{aligned}
&\hat{\Psi}_{\lambda}^{(-)\bullet}(x)\hat{\Psi}_{\lambda'}^{\dagger(-)\bullet}(y) = \\
&= \hat{\Psi}_{\lambda}^{(-)}(x)\hat{\Psi}_{\lambda'}^{\dagger(-)}(y) - \hat{\Psi}_{\lambda}^{(-)}(x)\hat{\Psi}_{\lambda'}^{\dagger(-)}(y) = 0
\end{aligned}
$$

Invece, per $t_x < t_y$,

$$
\begin{aligned}
&\hat{\Psi}_{\lambda}^{(-)\bullet}(x)\hat{\Psi}_{\lambda'}^{\dagger(-)\bullet}(y) = \\
&= -\hat{\Psi}_{\lambda'}^{\dagger(-)}(y)\hat{\Psi}_{\lambda}^{(-)}(x) - \hat{\Psi}_{\lambda}^{(-)}(x)\hat{\Psi}_{\lambda'}^{\dagger(-)}(y) = \\
&= -\frac{1}{V}\sum_{k,k'<k_F} e^{i(\vec{k}\cdot\vec{x}-\omega_k t_x)}e^{-i(\vec{k'}\cdot\vec{y}-\omega_{k'}t_y)}(-1)^{1-\lambda-\lambda'}\ \times \\
&\qquad \times\left(\hat{b}_{-\vec{k'},-\lambda'}\hat{b}^{\dagger}_{-\vec{k},-\lambda} + \hat{b}^{\dagger}_{-\vec{k},-\lambda}\hat{b}_{-\vec{k'},-\lambda'}\right) = \\
&= -\frac{\delta_{\lambda,\lambda'}}{V}\sum_{k,k'<k_F} \delta_{\vec{k},\vec{k'}}e^{i(\vec{k}\cdot\vec{x}-\omega_k t_x)}e^{-i(\vec{k'}\cdot\vec{y}-\omega_{k'}t_y)}(-1)^{1-\lambda-\lambda'} = \\
&= -\frac{\delta_{\lambda\lambda'}}{V}\sum_{k<k_F} e^{i\vec{k}\cdot(\vec{x}-\vec{y})}e^{-i\omega_k(t_x-t_y)} = iG^0_{\lambda\lambda'}(x,y)\theta(t_y-t_x)
\end{aligned}
$$

In conclusione:

$$\hat{\Psi}_{\lambda}^{(+)\bullet}(x)\hat{\Psi}_{\lambda'}^{\dagger(+)\bullet}(y) = \begin{cases} iG^0_{\lambda\lambda'}(x,y) & t_x > t_y \\ 0 & t_x < t_y \end{cases} \tag{3.21}$$

$$\hat{\Psi}_{\lambda}^{(-)\bullet}(x)\hat{\Psi}_{\lambda'}^{\dagger(-)\bullet}(y) = \begin{cases} 0 & t_x > t_y \\ iG^0_{\lambda\lambda'}(x,y) & t_x < t_y \end{cases} \tag{3.22}$$

Notiamo che le altre due contrazioni non nulle si ottengono con la regola:

$$\hat{U}^\bullet \hat{V}^\bullet = \pm \hat{V}^\bullet \hat{U}^\bullet$$

- **Contrazione di un campo con un campo aggiunto**

  Infine possiamo combinare i risultati precedenti per ottenere la contrazione di un operatore di campo con un campo aggiunto (o viceversa):

$$\begin{aligned} \hat{\Psi}_{\alpha}^{\bullet}(x)\hat{\Psi}_{\beta}^{\dagger\bullet}(y) &= \hat{\Psi}_{\alpha}^{(+)\bullet}(x)\hat{\Psi}_{\beta}^{\dagger(+)\bullet}(y) + \hat{\Psi}_{\alpha}^{(+)\bullet}(x)\hat{\Psi}_{\beta}^{\dagger(-)\bullet}(y) + \\ &+ \hat{\Psi}_{\alpha}^{(-)\bullet}(x)\hat{\Psi}_{\beta}^{\dagger(+)\bullet}(y) + \hat{\Psi}_{\alpha}^{(-)\bullet}(x)\hat{\Psi}_{\beta}^{\dagger(-)\bullet}(y) = \\ &= iG^0_{\alpha\beta}(x,y)\theta(t_x - t_y) + iG^0_{\alpha\beta}(x,y)\theta(t_y - t_x) = \\ &= iG^0_{\alpha\beta}(x,y) \end{aligned} \tag{3.23}$$

  e analogamente:

$$\hat{\Psi}_{\beta}^{\dagger\bullet}(y)\hat{\Psi}_{\alpha}^{\bullet}(x) = -iG^0_{\alpha\beta}(x,y), \tag{3.24}$$

  dove si è sfruttata la proprietà distributiva della contrazione rispetto alla somma di operatori.

3.3.2 Enunciato del teorema di Wick

Il prodotto cronologicamente ordinato di un numero (pari) di operatori è uguale alla somma di:
– il prodotto normale di tutti gli operatori
– il prodotto normale degli operatori, fra cui si sia fatta **una** *contrazione, in tutti i modi possibili*
– il prodotto normale degli operatori, fra cui si siano fatte **due** *contrazioni, in tutti i modi possibili*
– il prodotto normale degli operatori, fra cui si siano fatte **tre** *contrazioni,*

in tutti i modi possibili
– e così via, fino al termine in cui si sono contratte tutte le coppie di operatori, in tutti i modi possibili.

In formula:

$$
\begin{aligned}
& T\left(\hat{U}\hat{V}\hat{W}\ldots\hat{X}\hat{Y}\hat{Z}\right) = N\left(\hat{U}\hat{V}\hat{W}\ldots\hat{X}\hat{Y}\hat{Z}\right) + \\
+ \quad & N\left(\hat{U}^{\bullet}\hat{V}^{\bullet}\hat{W}\ldots\hat{X}\hat{Y}\hat{Z}\right) N\left(\hat{U}^{\bullet}\hat{V}\hat{W}^{\bullet}\ldots\hat{X}\hat{Y}\hat{Z}\right) + \\
+ \quad & .. + N\left(\hat{U}^{\bullet}\hat{V}^{\bullet\bullet}\hat{W}^{\bullet\bullet\bullet}\ldots\hat{X}^{\bullet\bullet\bullet}\hat{Y}^{\bullet\bullet}\hat{Z}^{\bullet}\right) = \\
= \quad & N\left(\hat{U}\hat{V}\hat{W}\ldots\hat{X}\hat{Y}\hat{Z}\right) + N\left(\begin{array}{c}\text{somma su tutte le possibili coppie}\\ \text{di contrazioni}\end{array}\right)
\end{aligned}
$$

La dimostrazione si fa per induzione, dimostrando che se è vero per N operatori, lo è anche per $N+1$ operatori; inoltre per $N=2$ il teorema concide banalmente con la definizione di contrazione, e pertanto risulta dimostrato.

3.4 Funzione di Green: teoria perturbativa

Introducendo la notazione *quadrimensionale*

$$x \equiv (\vec{x}, t)$$

e utilizzando i teoremi precedenti [in particolare la (3.7)], possiamo scrivere:

$$
\begin{aligned}
iG_{\alpha\beta}(x,y) = & \sum_{\nu=0}^{\infty}\left(-\frac{i}{\hbar}\right)^{\nu}\frac{1}{\nu!}\int_{-\infty}^{\infty}dt_1\ldots\int_{-\infty}^{\infty}dt_{\nu}\times \\
& \times\frac{\langle\phi_0|T\left(\hat{H}_1(t_1)\ldots\hat{H}_1(t_\nu)\hat{\Psi}_\alpha(x)\hat{\Psi}^{\dagger}_{\beta}(y)\right)|\phi_0\rangle}{\langle\phi_0|\hat{S}|\phi_0\rangle}
\end{aligned}
\tag{3.25}
$$

dove i campi (inclusi quelli contenuti nelle Halmiltoniane di interazione) *sono in descrizione di interazione.*

Conviene ancora scrivere il potenziale di interazione (istantaneo) come:

$$U(x_1, x_2) = V(\vec{x}_1, \vec{x}_2)\delta(t_1 - t_2) \quad . \tag{3.26}$$

In questo modo la funzione di Green assume un aspetto covariante, simile a quella che compare in QED relativistica dove peró l'interazione é mediata dallo scambio di fotoni virtuali del campo *e.m.*. Vi sono tuttavia tre differenze tra il caso presente e la QED:

1. L' elettrodinamica quantistica fa uso dell'interazione $e.m.$ ritardata, mentre nella fisica di sistemi a molticorpi facciamo uso di un potenziale istantaneo, proporzionale cioé alla $\delta(t_1 - t_2)$.
2. Il propagatore di singolo fermione (elettrone in QED) qui è non relativistico, quindi non contiene il termine di antiparticella; inoltre la relazione energia–impulso per il fermione è non relativistica.
3. Tipicamente in QED si studia la propagazione del singolo elettrone (positrone) o al più la sua interazione con un'altra particella o con un campo elettromagnetico esterno. Qui invece dobbiamo sempre tener conto della presenza del *mezzo* costituito dal sistema di fermioni, e della sua influenza dettata sia dal principio di Pauli che, eventualmente, dall'interazione.

Il formalismo, tuttavia, è il medesimo.

Calcoliamo ora il numeratore della (3.25) al I^o ordine (indicato con $\sim$)

$$\begin{aligned} i\tilde{G}_{\alpha\beta}(x,y) &\simeq iG^0_{\alpha\beta}(x,y) + \\ &+ \left(-\frac{i}{\hbar}\right) \sum_{\lambda\lambda',\mu\mu'} \frac{1}{2} \int\int d^4x_1 d^4x'_1 U(x_1,x'_1)_{\lambda\lambda',\mu\mu'} \times \\ &\times \langle\phi_0| T\left(\hat{\Psi}^\dagger_\lambda(x_1)\hat{\Psi}^\dagger_\mu(x'_1)\hat{\Psi}_{\mu'}(x'_1)\hat{\Psi}_{\lambda'}(x_1)\hat{\Psi}_\alpha(x)\hat{\Psi}^\dagger_\beta(y)\right)|\phi_0\rangle + \dots \end{aligned}$$

NB. si ricordi che l' Hamiltoniana di interazione fermionica in descrizione di Schrödinger é

$$\begin{aligned} \hat{H}_1 &= \\ &= \frac{1}{2}\sum_{\lambda\lambda',\mu\mu'} \int\int d\vec{x}_1 d\vec{x'}_1 \hat{\Psi}^\dagger_\lambda(\vec{x}_1)\hat{\Psi}^\dagger_\mu(\vec{x'}_1) V(\vec{x}_1,\vec{x'}_1)_{\lambda\lambda',\mu\mu'}\hat{\Psi}_{\mu'}(\vec{x'}_1)\hat{\Psi}_{\lambda'}(\vec{x}_1) \end{aligned} \tag{3.27}$$

mentre in descrizione di interazione [con $U(x_1, x'_1)$ dato dalla (3.26)] è:

$$\begin{aligned} \hat{H}_1(t_1) &= \\ &= \frac{1}{2}\sum_{\lambda\lambda',\mu\mu'} \int\int d\vec{x}_1 d^4x'_1 \hat{\Psi}^\dagger_\lambda(x_1)\hat{\Psi}^\dagger_\mu(x'_1) U(x_1,x'_1)_{\lambda\lambda',\mu\mu'}\hat{\Psi}_{\mu'}(x'_1)\hat{\Psi}_{\lambda'}(x_1) \end{aligned} \tag{3.28}$$

È importante notare che si possono assegnare tempi diversi ($t_1 \neq t'_1$) agli operatori di campo in $\vec{x_1}$ e $\vec{x'_1}$ (pur essendo l'Hamiltoniana definita a un instante "unico" t_1) grazie al fatto che il potenziale contiene una $\delta(t_1 - t'_1)$ la quale, ovviamente, elimina l'integrazione temporale nella (**??**).

Nel calcolo della funzione di Green il valor medio in $|\phi_0\rangle$ di tutti i termini contenenti prodotti normalmente ordinati di operatori di campo si annulla.

Rimangono soltanto i contributi in cui tutti gli operatori di campo sono contratti a coppie.

Le uniche contrazioni non nulle sono quelle (tra un campo e un campo aggiunto) esaminate nel paragrafo precedente. Allora é facile verificare che per il numeratore della funzione di Green di particella singola si ottengono, al prim'ordine perturbativo, $3! = 6$ termini, e precisamente:

$$i\tilde{G}^{(1)}_{\alpha\beta}(x,y) = -\frac{i}{2\hbar}\sum_{\lambda\lambda',\mu\mu'}\int\int d^4x_1 d^4x_1' U(x_1,x_1')_{\lambda\lambda',\mu\mu'} \times \tag{3.29}$$

$$\Bigg\{ \underline{iG^0_{\alpha\beta}(x,y)} \Bigg[\underbrace{iG^0_{\mu'\mu}(x_1',x_1')iG^0_{\lambda'\lambda}(x_1,x_1)}_{(A)} - \underbrace{iG^0_{\mu'\lambda}(x_1',x_1)iG^0_{\lambda'\mu}(x_1,x_1')}_{(B)} \Bigg]$$

$$+\underline{iG^0_{\alpha\lambda}(x,x_1)} \Bigg[\underbrace{iG^0_{\lambda'\mu}(x_1,x_1')\underline{iG^0_{\mu'\beta}(x_1',y)}}_{(C)} - \underbrace{\underline{iG^0_{\lambda'\beta}(x_1',y)}iG^0_{\mu'\mu}(x_1',x_1')}_{(D)} \Bigg]$$

$$+\underline{iG^0_{\alpha\mu}(x,x_1')} \Bigg[\underbrace{iG^0_{\mu'\lambda}(x_1',x_1)\underline{iG^0_{\lambda'\beta}(x_1,y)}}_{(E)} - \underbrace{\underline{iG^0_{\mu'\beta}(x_1',y)}iG^0_{\lambda'\lambda}(x_1,x_1)}_{(F)} \Bigg] \Bigg\}$$

Possiamo ora associare un diagramma ad ogni termine della (3.29): la funzione di Green libera G^0 è rappresentata da una linea retta con freccia che va dal secondo argomento al primo, mentre il potenziale d'interazione è rappresentato da una linea ondulata: tali diagrammi sono un modo molto conveniente di clessificare i termini derivanti, nello sviluppo perturbativo di G, dall'applicazione del teorema di Wick e sono noti in letteratura come diagrammi di Feynman. Quelli corrispondenti ai vari termini della (3.29) sono illustrati nella Fig. 3.1 (si noti che solo le G^0 sottolineate sono a tempi diversi).

I termini (A) , (D) e (F) contengono funzioni di Green con argomenti iniziale e finale identici (e quindi anche istanti di tempo uguali): esse vengono rappresentate da una linea continua che si chiude su se stessa (*loop*). Anche se la definizione di funzione di Green è in tal caso ambigua, occorre ricordare che tali loops provengono dalla contrazione di campi contenuti nell'Hamiltoniana di interazione dove essi compaiono sempre nell'ordine $\hat{\Psi}^\dagger\hat{\Psi}$ e non viceversa. Di conseguenza la funzione di Green a tempi uguali va

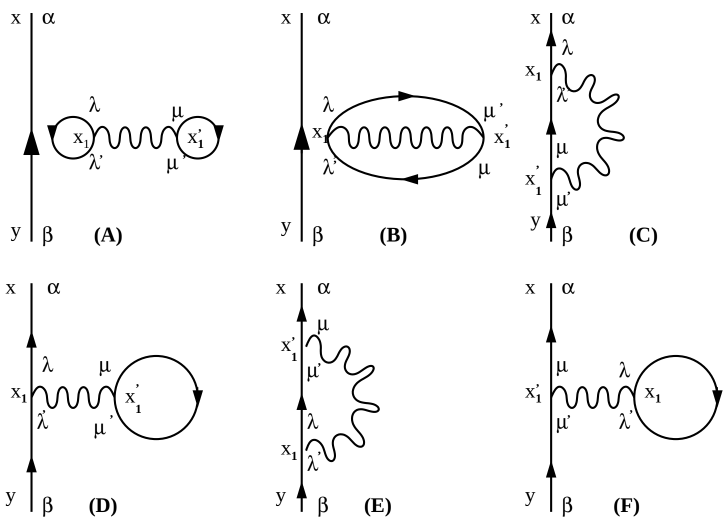


Figura 3.1: Diagrammi di Feynman per il numeratore del prim'ordine perturbativo della funzione di Green di particella singola, $i\tilde{G}^{(1)}_{\alpha\beta}(x,y)$.

interpretata come segue:

$$\begin{aligned} iG^0_{\alpha\beta}(x,x) &= \lim_{t'\to t^+} \langle\phi_0| T\left(\hat{\Psi}_\alpha(\vec{x}t)\hat{\Psi}^\dagger_\beta(\vec{x}t')\right)|\phi_0\rangle = \\ &= -\langle\phi_0|\hat{\Psi}^\dagger_\beta(\vec{x})\hat{\Psi}_\alpha(\vec{x})|\phi_0\rangle = -\frac{\delta_{\alpha\beta}}{2s+1} n^0(\vec{x}) \end{aligned} \tag{3.30}$$

dove $n^0(\vec{x} = n^0 = N/V$ è la densità (costante) per un sistema omogeneo infinito di fermioni di spin s che non sia polarizzato (per es. se immerso in un campo magnetico esterno). La densità delle particelle $n(\vec{x})$ in un sistema interagente non viene alterata dall'interazione, purché il sistema sia omogeneo ($V(\vec{x_1} - \vec{x_2})$ è invariante per traslazioni): in un sistema finito, invece, l'interazione potrà modificare la distribuzione delle particelle medesime, che comunque non è uniforme.

Si noti che i campi nella prima riga della (3.30) sono in descrizione di interazione, nella seconda sono in descrizione di Schrödinger.

I termini (D) ed (F) rappresentano l'interazione *diretta*, all'ordine più basso con tutte le particelle nello stato fondamentale non interagente (mare di Fermi), mentre i termini (C) ed (E) forniscono i corrispondenti termini *di scambio*. (La denominazione "diretto" e "di scambio" ha origine dal linguaggio delle funzioni d'onda antisimmetrizzate del sistema di fermioni identici).

I termini (A) e (B) invece sono *diagrammi disconnessi*, contenenti parti che non sono collegate al resto del diagramma da alcuna linea. Tipicamente essi contengono funzioni di Green che si chiudono sulle linee di interazione.

3.4.1 Cancellazione dei diagrammi disconnessi

Consideriamo ora il denominatore dello sviluppo perturbativo della fz. di Green

$$\begin{aligned} & \langle\phi_0|\hat{S}|\phi_0\rangle = \langle\phi_0|\hat{U}(\infty,-\infty)|\phi_0\rangle \\ = \; & \sum_{\nu=0}^{\infty}\left(-\frac{i}{\hbar}\right)^{\nu}\frac{1}{\nu!}\int_{-\infty}^{\infty}dt_1\ldots\int_{-\infty}^{\infty}dt_\nu\langle\phi_0|T\left(\hat{H}_1(t_1)\ldots\hat{H}_1(t_\nu)\right)|\phi_0\rangle = \\ = \; & 1-\frac{i}{\hbar}\frac{1}{2}\sum_{\lambda\lambda',\mu\mu'}\int\int d^4x_1d^4x_1'U(x_1,x_1')_{\lambda\lambda',\mu\mu'}\times \\ \times \; & \langle\phi_0|T\left(\hat{\Psi}^\dagger_\lambda(x_1)\hat{\Psi}^\dagger_\mu(x_1')\hat{\Psi}_{\mu'}(x_1')\hat{\Psi}_{\lambda'}(x_1)\right)|\phi_0\rangle+\ldots \end{aligned}$$

e al primo ordine

$$\begin{aligned} = \; & 1-\frac{i}{\hbar}\frac{1}{2}\sum_{\lambda\lambda',\mu\mu'}\int\int d^4x_1d^4x_1'U(x_1,x_1')_{\lambda\lambda',\mu\mu'}\times \\ \times \; & \left\{i\tilde{G}^0_{\mu'\mu}(x_1',x_1')i\tilde{G}^0_{\lambda'\lambda}(x_1,x_1)-i\tilde{G}^0_{\mu'\lambda}(x_1',x_1)i\tilde{G}^0_{\lambda'\mu}(x_1',x_1)\right\} \end{aligned}$$

$$=1+$$

Dunque diagrammaticamente avremo

$$iG_{\alpha\beta}(x,y)=$$

donde segue il teorema.

Analiticamente

$$iG_{\alpha\beta}(x,y) = \Big(iG^0_{\alpha\beta}(x,y) + (C) + (D) + (E) + (F)\Big) \times$$
$$\times \quad \frac{\Big(1 - \frac{i}{\hbar}\frac{1}{2}\sum_{\lambda\lambda',\mu\mu'}\int\int d^4x_1 d^4x_1' U(x_1,x_1')_{\lambda\lambda',\mu\mu'} \times}{\Big(1 - \frac{i}{\hbar}\frac{1}{2}\sum_{\lambda\lambda',\mu\mu'}\int\int d^4x_1 d^4x_1' U(x_1,x_1')_{\lambda\lambda',\mu\mu'} \times}$$
$$\frac{\times \Big\{i\tilde{G}^0_{\mu'\mu}(x_1',x_1')i\tilde{G}^0_{\lambda'\lambda}(x_1,x_1) - i\tilde{G}^0_{\mu'\lambda}(x_1',x_1)i\tilde{G}^0_{\lambda'\mu}(x_1',x_1)\Big\}\Big)}{\times \Big\{i\tilde{G}^0_{\mu'\mu}(x_1',x_1')i\tilde{G}^0_{\lambda'\lambda}(x_1,x_1) - i\tilde{G}^0_{\mu'\lambda}(x_1',x_1)i\tilde{G}^0_{\lambda'\mu}(x_1',x_1)\Big\}\Big)}$$

Si osservi che tutti i sei termini che compaiono in $G^{(1)}_{\alpha\beta}$ hanno almeno una G^0 a tempi uguali, ma i diagrammi disconnessi ne hanno due. Questo é il motivo per cui i diagrammi disconnessi *divergono* !

Essi vengono eliminati tramite il teorema di Gell-Mann e Low che non é *regolarizzazione* (cioé non é un metodo per rendere *finiti* degli integrali divergenti) e non é neanche *rinormalizzazione* perché rimuove gli infiniti cancelandoli fra numeratore e denominatore e *non* ridefinendo la carica, la massa etc.

Per la dimostrazione generale della formula

$$\begin{aligned} iG_{\alpha\beta}(x,y) &= \sum_{m=0}^{\infty}\left(-\frac{i}{\hbar}\right)^m \frac{1}{m!}\int_{-\infty}^{\infty} dt_1 \ldots \int_{-\infty}^{\infty} dt_m \times \\ &\times \quad \langle\phi_0|T\left(\hat{H}_1(t_1)\ldots\hat{H}_1(t_m)\hat{\Psi}_\alpha(x)\hat{\Psi}^\dagger_\beta(y)\right)|\phi_0\rangle_C \end{aligned}$$

vedi [**?**] (C sta per connessi).

Quanti sono i diagrammi connessi e topologicamente distinti ad un dato ordine perturnativo m?

$$N_m = \frac{(2m+1)! - Z_m}{2^m m!}$$

dove Z_m é il numero di diagrammi disconnessi all' ordine perturbativo m.

Il 2^m a denominatore é dovuto alla simmetria del potenziale: infatti dalle contrazioni prebviste dal teorema di Wick *si generano sempre coppie di diagrammi topologicamente identici*, ma con le variabili (sulle quali si integra o, nel caso dello spin, si somma) alle estremitá di una linea di potenziale scambiate. Basta dunque considerare uno solo di tali diagrammi e nel contempo *omettere* il fattore 1/2 di fronte al potenziale.

Infine osserviamo che le m Hamiltoniane all' interno del time-ordering possono essere commutate a piacere: esse generano $m!$ termini tutti equivalenti. Basta dunque considerarne uno solo e nel contempo omettere $m!$ al denominatore.

3.5 regole di Feynman per l' m-esimo ordine perturbativo per la funzione di Green di particella singola

1. si traccino tutti i diagrammi connessi e topologicamente distinti con m linee di interazione e $2m+1$ fz. di Green libere
2. si caratterizzi ciascun vertice con un punto $x_i \equiv (\vec{x}_i, t_i)$ dello spazio quadrimensionale
3. ogni linea continua con freccia fra due vertici $\begin{pmatrix} \beta & & \alpha \\ y & & x \end{pmatrix}$ rappresenta una fz. di Green libera $G^0_{\alpha\beta}(x,y)$
4. ogni linea ondulata rappresenta un' interazione

$$U(x,y)_{\lambda\lambda',\mu\mu'} = V(\vec{x},\vec{y})_{\lambda\lambda',\mu\mu'}\delta(t_x - t_y) \equiv$$

5. si integri su tutte e variabili interne spaziali e temporali
6. vi é un prodotto di matrici di spin lungo ogni linea fermionica, includendo il potenziale a ciascun vertice e una somma sugli indici interni di spin
7. si includa il fattore segnante $(-1)^l$: l numero dei loops
8. si includa un fattore $\left(\frac{i}{\hbar}\right)^m = (-i)\left(-\frac{i}{\hbar}\right)^m i^{2m+1}$.

Con queste regole abbiamo una prescrizione univoca per scrivere l' espressione analitica corrispondente a ciasun diagramma di Feynman che contribuisce a $G_{\alpha\beta}(x,y)$ ad un dato ordine perturbativo.

Esempio: I^o **ordine perturbativo** $(m = 1)$

$$
\begin{aligned}
&iG^{(1)}_{\alpha\beta}(x,y) = \\
&= \frac{i}{\hbar}\int\int d^4x_1 d^4x_1' \Big\{ -G^0_{\alpha\lambda}(x,x_1)U(x_1,x_1')_{\lambda\lambda',\mu\mu'}G^0_{\mu'\mu}(x_1',x_1')\times \\
&\times G^0_{\lambda'\beta}(x_1,y) + G^0_{\alpha\lambda}(x,x_1)\,U(x_1,x_1')_{\lambda\lambda',\mu\mu'}G^0_{\lambda'\mu}(x_1,x_1')G^0_{\mu'\beta}(x_1',y)\Big\}
\end{aligned}
$$

NB. si ricordi che indici ripetuti si intendono sommati

II^o **ordine perturbativo** ($m = 2$) 10 diagrammi connessi, topologicamente distinti

3.6 Feynman diagrams in momentun space

Per un sistema uniforme e isotropo

$$G_{\alpha\beta}(x,y) = \frac{1}{(2\pi)^4}\int d^4k e^{ik(x-y)} G_{\alpha\beta}(k)$$

$$G^0_{\alpha\beta}(x,y) = \frac{1}{(2\pi)^4}\int d^4k e^{ik(x-y)} G^0_{\alpha\beta}(k)$$

Inoltre $d^4k = d\vec{k}d\omega \qquad kx = \vec{k}\cdot\vec{x} - \omega t.$

Per il potenziale

$$U(x,x')_{\alpha\alpha',\beta\beta'} = \frac{1}{(2\pi)^4}\int d^4k e^{ik(x-x')} U(k)_{\alpha\alpha',\beta\beta'} =$$

e poiché $U(k)$ é frequency independent

$$\begin{aligned} &= \frac{1}{(2\pi)^3}\int d\vec{k} e^{i\vec{k}\cdot(\vec{x}-\vec{x'})} V(\vec{k})_{\alpha\alpha',\beta\beta'} \frac{1}{(2\pi)}\int_{-\infty}^{\infty} d\omega e^{-i\omega(t-t')} = \\ &= \frac{1}{(2\pi)^3}\int d\vec{k} e^{i\vec{k}\cdot(\vec{x}-\vec{x'})} V(\vec{k})_{\alpha\alpha',\beta\beta'} \delta(t-t') \end{aligned}$$

Come applicazione valutiamo l' *exchange* del I^o ordine perturbativo

$$\begin{aligned} & G^{(1),ex}_{\alpha\beta}(x,y) = \frac{i}{\hbar}\sum_{\lambda\lambda',\mu\mu'}\int d^4x_1 d^4x'_1 G^0_{\alpha\lambda}(x,x_1) U(x_1,x'_1)_{\lambda\lambda',\mu\mu'} \times \\ \times\ & G^0_{\lambda'\mu}(x_1,x'_1) G^0_{\mu'\beta}(x'_1,y) = \\ & = \frac{i}{\hbar}\sum_{\lambda\lambda',\mu\mu'}\int d^4x_1 d^4x'_1 \int d^4k d^4p d^4p_1 d^4q e^{ik(x-x_1)} G^0_{\alpha\lambda}(k) \times \\ \times\ & e^{ip(x_1-x'_1)} G^0_{\lambda'\mu}(p) e^{iq(x_1-x'_1)} U(q)_{\lambda\lambda',\mu\mu'} e^{ip_1(x'_1-y)} G^0_{\mu'\beta}(p_1)\ . \end{aligned}$$

Gli integrali su d^4x_1 e $d^4x'_1$ sono immediati

$$\begin{aligned} & \frac{1}{(2\pi)^4}\int d^4x_1 e^{ix_1(p+q-k)} \frac{1}{(2\pi)^4}\int d^4x'_1 e^{ix_1(p_1-q-p)} = \\ =\ & \delta^4(p+q-k)\delta^4(p_1-q-p) \end{aligned}$$

eppertanto

$$\begin{aligned} & G^{(1),ex}_{\alpha\beta}(x,y) = \\ =\ & \frac{i}{\hbar}\frac{1}{(2\pi)^8}\sum_{\lambda\lambda',\mu\mu'}\int d^4k d^4p d^4p_1 d^4q \delta^4(p+q-k)\delta^4(p_1-q-p) \times \\ \times\ & e^{ikx} e^{-ip_1y} G^0_{\alpha\lambda}(k) G^0_{\lambda'\mu}(p) U(q)_{\lambda\lambda',\mu\mu'} G^0_{\mu'\beta}(p_1) \end{aligned}$$

Integriamo ora su p_1 pe q utilizzando le δ

$$\begin{aligned}
& G^{(1),ex}_{\alpha\beta}(x,y) = \\
= \; & \frac{i}{\hbar}\frac{1}{(2\pi)^4}\sum_{\lambda\lambda',\mu\mu'}\int d^4k e^{ik(x-y)} G^0_{\alpha\lambda}(k)\int\frac{d^4p}{(2\pi)^4}U(k-p)_{\lambda\lambda',\mu\mu'}\times \\
\times \; & G^0_{\lambda'\mu}(p)G^0_{\mu'\beta}(k) \\
= \; & \int\frac{d^4k}{(2\pi)^4}e^{ik(x-y)}\left\{\frac{i}{\hbar}\sum_{\lambda\lambda',\mu\mu'}G^0_{\alpha\lambda}(k)\int\frac{d^4p}{(2\pi)^4}U(k-p)_{\lambda\lambda',\mu\mu'}\times\right. \\
\times \; & \left. G^0_{\lambda'\mu}(p)G^0_{\mu'\beta}(k)\right\}
\end{aligned}$$

Eppertanto

$$G^{(1),ex}_{\alpha\beta}(x,y) = \frac{i}{\hbar}G^0_{\alpha\lambda}(k)\int\frac{d^4p}{(2\pi)^4}U(k-p)_{\lambda\lambda',\mu\mu'}G^0_{\lambda'\mu}(p)G^0_{\mu'\beta}(k)$$

NB. Le due fz δ di Dirac quadrimensionali assicurano la conservazione energia-impulso a ciascun vertice interno del diagramma di exchange. *Conviene pertanto assegnare una direzione convenzionale anche all' interazione.*

3.7 Regole di Feynman nello spazio degli impulsi

1. si disegnino tutti i diagrammi connessi e topologicamente distinti con m linee di interazione e $2m+1$ linee di particelle (corrispondenti alle fz. di Green libere)

2. si assegni una direzione ad ogni linea di propagazione e di interazione quindi si associ un quadrimpulso ad ogni linea (di interazione e propaga- zione), *orientato come la linea stessa*, in modo tale che il quadrimpulso venga conservato ad ogni vertice

   $$\text{somma impulsi entranti} \; = \; \text{somma impulsi uscenti}$$

   tenendo conto del fatto che l' impulso uscente da β e quello entrante in α devono coincidere

3. a ciascuna linea continua corrisponde una fz. di Green libera e cioé un fattore

$$G^0_{\alpha\beta}(k) = \delta_{\alpha\beta}\left[\frac{\theta(|\vec{k}| - k_F)}{\omega - \omega_{\vec{k}} + i\eta} + \frac{\theta(k_F - |\vec{k}|)}{\omega - \omega_{\vec{k}} - i\eta}\right\}$$

4. ad ogni linea ondulata corrisponde un' interazione

$$U(q)_{\lambda\lambda',\mu\mu'} = V(\vec{q})_{\lambda\lambda',\mu\mu'}$$

5. si sommi sugli indici di spin lungo le linee di particella singola, includendo il potenziale a ciascun vertice
6. si integri sugli m quadrimpulsi interni indipendenti
7. si moltiplichi per il fattore $\frac{1}{(2\pi)^{4m}}\left(\frac{i}{\hbar}\right)^m$
8. si moltoiplichi per il fattore segnante $(-1)^l$ (l numero dei loops)

CAVEAT: ogni linea di propagazione che formi un loop o che colleghi i due vertici di una stessa interazione va intesa come

$$e^{i\omega\eta}G^0_{\alpha\beta}(\vec{k},\omega)$$

dove $\eta \to 0^+$ alla fine del calcolo (ció equivale a considerare il limite $t' \to t^+$ per la $G^0_{\alpha\beta}(\vec{x}t, \vec{x'}t')$ nello spazio delle configurazioni).

Esempio : I^0 ordine perturbativo

$$G^{(1)}_{\alpha\beta}(k) = -\frac{i}{\hbar}\sum_{\lambda\lambda',\mu\mu'}\int\frac{d^4k_1}{(2\pi)^4}G^0_{\alpha\lambda}(k)U(0)_{\lambda\lambda',\mu\mu'}G^0_{\lambda'\beta}(k)G^0_{\mu'\mu}(k_1)e^{i\omega_1\eta}$$

$$
\begin{aligned}
&+\frac{i}{\hbar}\sum_{\lambda\lambda',\mu\mu'}\int\frac{d^4k_1}{(2\pi)^4}G^0_{\alpha\lambda}(k)U(k-k_1)_{\lambda\lambda',\mu\mu'}G^0_{\lambda'\mu}(k_1)G^0_{\mu'\beta}(k)e^{i\omega_1\eta}=\\
&=\frac{i}{\hbar}\frac{1}{(2\pi)^4}G^0(k)\left\{-\int d^4k_1U(0)_{\lambda\lambda',\mu\mu'}G^0(k_1)e^{i\omega_1\eta}\delta_{\alpha\lambda}\delta_{\lambda'\beta}\delta_{\mu\mu'}+\right.\\
&\left.+\int d^4k_1U(k-k_1)_{\lambda\lambda',\mu\mu'}G^0(k_1)e^{i\omega_1\eta}\delta_{\alpha\lambda}\delta_{\lambda'\mu}\delta_{\mu'\beta}\right\}G^0(k)=\\
&=\frac{i}{\hbar}\frac{1}{(2\pi)^4}G^0(k)\int d^4k_1\left[-U(0)_{\alpha\beta,\mu\mu}+U(k-k_1)_{\alpha\mu,\mu\beta}\right]G^0(k_1)e^{i\omega_1\eta}G^0(k)
\end{aligned}
$$

dove si é introdotta la notazione $U(0)\equiv U(k=0)$ e si sono liquidate tutte le δ (indici ripetuti si intendono sommati).

3.8 Interazione

Per valutare piú specificamente il I^o ordine perturbativo assumiamo una interazione generale della forma

$$V(\vec{x}_1s_1,\vec{x}_2s_2)=V_0(|\vec{x}_1-\vec{x}_2|)\mathbf{1}_1\mathbf{1}_2+V_1(|\vec{x}_1-\vec{x}_2|)\vec{\sigma}_1\cdot\vec{\sigma}_2\ .$$

Gli elementi di matrice del potenziale che ci interessano saranno allora

I^o) spin independent interaction $\mathbf{1}_1\mathbf{1}_2$
(cioé matrici identitá per entrambe le particelle)

$$U(q)_{\alpha\beta,\lambda\mu}=U(q)\delta_{\alpha\beta}\delta_{\lambda\mu}$$

per cui

$$U_{\alpha\beta,\mu\mu}=2U\delta_{\alpha\beta}\qquad\text{direct}$$

$$U_{\alpha\mu,\mu\beta}=U\delta_{\alpha\beta}\qquad\text{exchange}$$

II^o) spin-dependent interaction $\vec{\sigma}_1\cdot\vec{\sigma}_2$

$$U(q)_{\alpha\beta,\lambda\mu}=U(q)\vec{\sigma}_{(1)\alpha\beta}\vec{\sigma}_{(2)\lambda\mu}$$

ma poiché $tr\vec{\sigma}=0$ e $\vec{\sigma}^2=3$ sará

$$U_{\alpha\beta,\mu\mu}=U\vec{\sigma}_{\alpha\beta}\cdot\vec{\sigma}_{\mu\mu}=0\qquad\text{direct}$$

$$U_{\alpha\mu,\mu\beta}=U\left[\vec{\sigma}^2\right]_{\alpha\beta}=3U\delta_{\alpha\beta}\qquad\text{exchange}$$

NB. in tutti i casi $G^{(1)}_{\alpha\beta}(k)$ risulta diagonale negli indici di spin come ha da essere per la conservazione della paritá.

Avremo finalmente

$$\begin{aligned} G^{(1)}_{\alpha\beta}(k) &= \delta_{\alpha\beta}\frac{i}{\hbar}G^0(k)\frac{1}{(2\pi)^4}\int d^4k_1\Big\{\Big[-2V_0(0)+V_0(\vec{k}-\vec{k_1})+3V_1(\vec{k}-\vec{k_1})\Big]\times \\ &\times \quad G^0(k_1)e^{i\omega_1\eta}\Big\}\,G^0(k) \end{aligned}$$

Osservazioni molto importanti

1. l' interazione $\vec{\sigma}_1\cdot\vec{\sigma}_2$ contribuisce soltanto all' exchange
2. notare la tipica struttura: il primo e l' ultimo fattore di $G^{(1)}_{\alpha\beta}(k)$ sono fz. di Green libere $G^0(k)$.

Elaborazione ulteriore

$$\begin{aligned} &G^{(1)}_{\alpha\beta}(k) = \delta_{\alpha\beta}\frac{i}{\hbar}G^0(k)\int\frac{d\vec{k}_1}{(2\pi)^3}\left[-2V_0(0)+V_0(\vec{k}-\vec{k_1})+3V_1(\vec{k}-\vec{k_1})\right]\times \\ &\times\frac{2\pi i}{2\pi}\theta(k_F-k_1)G^0(k) = \\ &= \frac{\delta_{\alpha\beta}}{\hbar}G^0(k)\int\frac{d\vec{k}_1}{(2\pi)^3}\left[2V_0(0)-V_0(\vec{k}-\vec{k_1})-3V_1(\vec{k}-\vec{k_1})\right]\theta(k_F-k_1)G^0(k) = \\ &= \frac{\delta_{\alpha\beta}}{\hbar}G^0(k)\left\{\frac{k_F^3}{3\pi^2}V_0(0)-\int\frac{d\vec{k}_1}{(2\pi)^3}\left[V_0(\vec{k}-\vec{k_1})+3V_1(\vec{k}-\vec{k_1})\right]\theta(k_F-k_1)\right\}G^0(k) \end{aligned}$$

3.9 Dyson equation

La struttura che abbiamo visto essere tipica del I^o ordine perturbativo permane ad ogni ordine: il primo e l' ultimo fattore di $G^{(m)}(k)$, qualunque sia m, sono delle fz. di Green libere $G^0(k)$ *giacché il quadrinpulso deve essere identico nelle linee di particella iniziale e finale di qualsiasi diagramma*; pertanto *la fz. di Green esatta si puó sempre scrivere nella forma*

$$G(k) = G^0(k) + G^0(k)\Sigma(k)G^0(k)$$

che definisce la *self-energia* $\Sigma(k)$ e si puó rappresentare diagrammaticamente cosí

$$= \qquad\qquad +$$

$\uparrow$	$\uparrow$	$\uparrow$
fz. di Green esatta	fz. di Green libera	self-energia $\Sigma(k)$ nello spazio delle coordinate $\Sigma(x_1, x_1')$

3.9.1 Self-energia al I^o ordine

Ovviamente sará

$$\hbar\Sigma^{(1)}(k) = \frac{i}{(2\pi)^4}\int d^4k_1 \left[-2V_0(0)+V_0(\vec{k}-\vec{k_1})+3V_1(\vec{k}-\vec{k_1})\right] G^0(k_1)e^{i\omega_1\eta} \ .$$

L' integrale sulla frequenza é immediato

$$\frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} e^{i\omega_1\eta}\left[\frac{\theta(k_1-k_F)}{\omega-\omega_{\vec{k}_1}+i\eta}+\frac{\theta(k_F-k_1)}{\omega-\omega_{\vec{k}_1}-i\eta}\right] = i\theta(k_F-k_1)$$

quindi

$$\begin{aligned}\hbar\Sigma^{(1)}(k) &= -\frac{1}{(2\pi)^3}\int d\vec{k}_1 \left[-2V_0(0)+V_0(\vec{k}-\vec{k_1})+3V_1(\vec{k}-\vec{k_1})\right]\theta(k_F-k_1)\\ &= nV_0(0)-\frac{1}{(2\pi)^3}\int d\vec{k}_1\left[V_0(\vec{k}-\vec{k_1})+3V_1(\vec{k}-\vec{k_1})\right]\theta(k_F-k_1)\end{aligned}$$

dove $n = N/V = (k_F^3)/(3\pi^2)$ é la densitá di particelle del sistema.

Notare:

a) la forza indipendente dallo spin contribuisce tanto al direct che all' exchange; la forza $\vec{\sigma}_1\cdot\vec{\sigma}_2$ solo all' exchange;

b) $\Sigma^{(1)}(k)$ é reale e indipendente da ω;

c) i due termini di cui é composta $\hbar\Sigma^{(1)}(k)$ si possono rappresentare graficamente cosí:

Il primo rappresenta l' approssimazione di Born per lo scattering in avanti ($\vec{q}=0$) della particella che si propaga da parte delle altre particelle che costituiscono il mezzo, il secondo rappresenta il termine di scambio, sempre in approssimazione di Born, nello scattering tra particelle e mezzo.

Anche nello spazio delle coordinate la fz. di Green consiste di quella libera piú tutti i termini connessi e topologicamente distinti con una fz. di Green libera a ciascuna estremitá.

Quindi a qualunque ordine perturbativo, e per conseguenza globalmente, potremo scrivere

$$G_{\alpha\beta}(x,y)=G^0_{\alpha\beta}(x,y)+\int\int d^4x_1 d^4x_1' G^0_{\alpha\lambda}(x,x_1)\Sigma_{\lambda\mu}(x_1,x_1')G^0_{\mu\beta}(x_1',y) \ .$$

In generale *una inserzione di self-energia viene definita come una qualsiasi parte di un diagramma connessa al resto del diagramma stesso da due linee di particella* (una entrante ed una uscente)

Self-energia propria: una inserzione di self-energia che **non** puó essere separata in due parti dividendo un' unica linea di particella. Per definizione la self-energia propria é la somma di tutte le parti **irriducibili** di self-energia a tutti gli ordini perturbativi e si indica con $\Sigma^*_{\alpha\beta}(x_1,x_1')$.

Al primo ordine perturbativo $\Sigma^{(1)}(x_1,x_1')=\Sigma^{(1)*}(x_1,x_1')$.

Al secondo

I primi quattro diagrammi rappresentano semplicemente le possibili iterazioni, al secondo ordine, di $\Sigma^{(1)*}$ eppertanto sono diagrammi riducibili, mentre tutti gli altri sono irriducibili.

L' insieme dei diagrammi irriducibili costituisce la sefl-energia propria.

Pertanto scriveremo

$$
\begin{aligned}
& \Sigma(x_1, x_1') = \\
& \Sigma^*(x_1, x_1') + \int\int d^4x_2 d^4x_2' \Sigma^*(x_2, x_2') G^0(x_2, x_2') \Sigma^*(x_2', x_1') + \\
+ \quad & \int d^4x_2 d^4x_2' \int d^4x_3 d^4x_3' \Sigma^*(x_1, x_2') G^0(x_2, x_2') \times \\
\times \quad & \Sigma^*(x_2', x_3) G^0(x_3, x_3') \Sigma^*(x_3', x_1') + \ldots
\end{aligned}
$$

dove si sono omessi, per brevitá, gli indici matriciali di spin.

Graficamente

Corrispondentemente avremo

$$
\begin{aligned}
G(x,y) &= G^0(x,y) + \int\int d^4x_1 d^4x_1' G^0(x, x_1) \Sigma^*(x_1, x_1') G^0(x_1', y) + \\
&+ \int d^4x_1 d^4x_1' G^0(x, x_1) \int d^4x_2 d^4x_2' \Sigma^*(x_1, x_2) G^0(x_2, x_2') \times \\
&\times \Sigma^*(x_2', x_1') G^0(x_1', y) + .. \\
&= G^0(x,y) + \int\int d^4x_1 d^4x_1' G^0(x, x_1) \Sigma^*(x_1, x_1') G^0(x_1', y) + \\
&+ \int d^4x_1 d^4x_2 G^0(x, x_1) \Sigma^*(x_1, x_2) \\
&\times \int d^4x_1' d^4x_2' G^0(x_2, x_2') \Sigma^*(x_2', x_1') G^0(x_1, y) + ..
\end{aligned}
$$

cambiando $x_2 \leftrightarrow x'_1$

$$
\begin{aligned}
&= G^0(x,y) + \int\int d^4x_1 d^4x'_1 G^0(x,x_1)\Sigma^*(x_1,x'_1) \times \\
&\times \left\{ G^0(x'_1,y) + \int d^4x_2 d^4x'_2 G^0(x'_1,x'_2)\Sigma^*(x'_2,x_2)G^0(x_2,y) + .. \right\} .
\end{aligned}
$$

Pertanto potremo scrivere l' eq. di Dyson

$$
G_{\alpha\beta}(x,y) = G^0_{\alpha\beta}(x,y) + \int d^4x_1 d^4x'_1 G^0_{\alpha\lambda}(x,x_1)\Sigma^*_{\lambda\mu}(x_1,x'_1)G_{\mu\beta}(x'_1,y)
$$

e diagrammaticamente

L' eq. di Dyson diventa molto piú semplice se l' interazione é invariante per traslazioni e il sistema é spazialmente uniforme. Definendo

$$
\Sigma^*_{\alpha\beta}(x,y) = \frac{1}{(2\pi)^4}\int d^4k e^{ik(x-y)}\Sigma^*_{\alpha\beta}(k)
$$

avremo

$$
\begin{aligned}
&\frac{1}{(2\pi)^4}\int d^4k e^{ik(x-y)}G_{\alpha\beta}(k) = \frac{1}{(2\pi)^4}\int d^4k e^{ik(x-y)}G^0_{\alpha\beta}(k) + \\
&+\int\int d^4x_1 d^4x'_1 \int \frac{d^4k}{(2\pi)^4}e^{ik(x-x_1)}G^0_{\alpha\lambda}(k)\int\frac{d^4k'}{(2\pi)^4}e^{ik'(x_1-x'_1)}\Sigma^*_{\lambda\mu}(k') \times \\
&\times \int \frac{d^4k''}{(2\pi)^4}e^{ik''(x'_1-y)}G_{\mu\beta}(k)
\end{aligned}
$$

Poiché

$$
\int \frac{d^4x_1}{(2\pi)^4}e^{ix_1(-k+k')} = \delta(k-k')
$$

e

$$
\int \frac{d^4x'_1}{(2\pi)^4}e^{ix'_1(-k'+k'')} = \delta(k''-k')
$$

otterremo per il secondo termine del RHS

$$\frac{1}{(2\pi)^4}\int d^4k d^4k' d^4k'' e^{ikx} e^{-ik''y} G^0_{\alpha\lambda}(k)\Sigma^*_{\lambda\mu}(k')G_{\mu\beta}(k'') \times$$
$$\times\delta(k'-k)\delta(k''-k') =$$
$$= \int d^4k e^{ik(x-y)} G^0_{\alpha\lambda}(k)\Sigma^*_{\lambda\mu}(k)G_{\mu\beta}(k)$$

per cui finalmente

$$G_{\alpha\beta}(k) + G^0_{\alpha\beta}(k) + G^0_{\alpha\lambda}(k)\Sigma^*_{\lambda\mu}(k)G_{\mu\beta}(k)$$

Poiché G , G^0 e Σ^* sono solitamente diagonali negli indici di spin scriveremo semplicemente

$$G(k) = G^0(k) + G^0(k)\Sigma^*(k)G(k)$$

che é algebrica e la cui soluzione é

$$G(k) = \frac{1}{[G^0(k)]^{-1} - \Sigma^*(k)} \quad .$$

Ora

$$G^0_{\alpha\beta}(\vec{k},\omega) = \delta_{\alpha\beta}\left[\frac{\theta(k-k_F)}{\omega-\omega_{\vec{k}}+i\eta} + \frac{\theta(k_F-k)}{\omega-\omega_{\vec{k}}-i\eta}\right] \equiv \delta_{\alpha\beta}G^0(\vec{k},\omega)$$

pertanto poiché $|\vec{k}|$ é o piú grande o piú piccolo di k_F segue che

$$[G^0(k)]^{-1} = \omega - \omega_{\vec{k}} \qquad \text{qui infatti le parti immaginarie sono irrilevanti}$$

Pertanto la soluzione dell' eq. di Dyson per il propagatore di particella singola in un sistema omogeneo infinito sará

$$G_{\alpha\beta}(\vec{k},\omega) = \delta_{\alpha\beta}\frac{1}{\omega-\omega_{\vec{k}}-\Sigma^*(\vec{k},\omega)} \quad .$$

Dalla rappresentazione di Lehmann sappiamo che le singolaritá di $G_{\alpha\beta}(\vec{k},\omega)$ nel piano complesso di ω determinano tanto le energie di eccitazione $\epsilon_{\vec{k}}$ del sistema che i loro damping $\gamma_{\vec{k}}$. Avremo dunque

$$\hbar\omega = \epsilon^0_{\vec{k}} + \hbar\Sigma^*(\vec{k},\omega)$$

che in genere é un eq. trascendente.

A suo tempo si era visto che il potenziale chimico μ corrisponde all' energia cui $\mathcal{I}m G_{\alpha\beta}(\vec{k},\omega)$ cangia segno.

Adesso possiamo equivalentemente affermare che, poiché

$$\mathcal{I}m\Sigma^*(\vec{k},\omega) \geq 0 \qquad \text{per} \quad \omega < \frac{\mu}{\hbar}$$

$$\mathcal{I}m\Sigma^*(\vec{k},\omega) \leq 0 \qquad \text{per} \quad \omega > \frac{\mu}{\hbar} \ ,$$

il potenziale chimico puó essere determinato dal punto in cui $\mathcal{I}m\Sigma^*(\vec{k},\omega)$ cangia segno in ω. Per quale valore di $\vec{k}$? **Per un solo valore:** $k = k_F$.

Cerchiamo i poli nel caso della self-energia propria al primo ordine perturbativo che sappiamo essere $i)$ *frequency independent* $ii)$ *real.*

In questo caso, ricordando l' espressione precedentemente ricavata per $\Sigma^{*(1)}(\vec{k})$ si ottiene per il polo del propagatore

$$\begin{aligned} \hbar\omega &= \epsilon^0_{\vec{k}} + \hbar\Sigma^{*(1)}(\vec{k}) = \frac{\hbar^2\vec{k}^2}{2m} + nV_0(0) + \\ &- \frac{1}{(2\pi)^3}\int d\vec{k'}\left[V_0(\vec{k}-\vec{k'}) + 3V_1(\vec{k}-\vec{k'})\right]\theta(k_F - k') \end{aligned}$$

Si noti:

1. l' energia di una particella (o di un buco) contiene ora uno shift $nV_0(0)$ *costante* (direct contribution) che corrisponde allo scattering in avanti di tale particella (o buco) da parte di tutte le altre particelle del mezzo;
2. l' exchange contribution dipende invece da $\vec{k}$;
3. la fz. d' Green di particella singola contiene ora infiniti diagrammi perturbativi, pur essendo la self-energia propria calcolata solo al I^o ordine perturbativo e **questo mostra la potenza dell' eq. di Dyson**.

4. proprietá di analiticitá

   a) $G^0_{\alpha\beta}(\vec{k},\omega)$ ha un solo polo per $\vec{k}$ fissato;

   b)

$$G^0_{\alpha\beta}(\vec{k},\omega)=\delta_{\alpha\beta}\left[\frac{\theta(k-k_F)}{\omega-\omega_{\vec{k}}-\Sigma^{*(1)}(\vec{k})+i\eta}+\frac{\theta(k_F-k)}{\omega-\omega_{\vec{k}}-\Sigma^{*(1)}(\vec{k})-i\eta}\right]$$

   ha anche un solo polo per $\vec{k}$ fissato;

   c) ma $G^{(1)}_{\alpha\beta}(\vec{k},\omega)$ **non ha** le singolaritá giuste. Infatti la presenza di $[G^0_{\alpha\beta}(\vec{k},\omega)]^2$ produce necessariamente un polo doppio.

   Per avere le singolaritá giuste occorre dunque sommare infiniti diagrammi perturbativi

   d) $\Sigma^{*(2)}(\vec{k},\omega)$ introduce piú poli per $\vec{k}$ fissato ? Se si, ció significa che nel sistema a molti corpi sono possibili piú stati di particella singola per $\vec{k}$ fissato.

NB. É interessante la formula *b*). In questo caso infatti la soluzione dell' eq. di Dyson si dovrebbe scrivere

$$G_{\alpha\beta}(\vec{k},\omega)=\delta_{\alpha\beta}\frac{1}{\omega-\omega_{\vec{k}}-\Sigma^{*(1)}(\vec{k})}$$

e avrebbe un polo sull' asse reale. Occorre dunque una prescrizione per andare attorno al polo. Questa é fornita dalla formula *b*) che, fra l' altro, fornisce correttamente il caso libero quando si spegne l' interazione. Nel caso generale invece $\Sigma^*(\vec{k},\omega)$ ha una parte immaginaria, quindi i poli giacciono nel piano complesso di ω e non c'é alcun bisogno di scrivere in modo diverso la soluzione dell' eq. di Dyson.

Considerazioni sulla self-energia

La teoria perturbativa, ad ogni ordine, conduce alla struttura

$$G_{\alpha\beta}(x,y)=G^0_{\alpha\beta}(x,y)+\int d^4x_1d^4x_1'G^0_{\alpha\lambda}(x,x_1)\Sigma_{\lambda\mu}(x_1,x_1')G_{\mu\beta}(x_1',y)\ .$$

Questa struttura si verifica per il direct I^o ordine ? Si ! Infatti

$$\begin{aligned}
&G^{1,D}_{\alpha\beta}(x,y) = \\
&= -\frac{i}{\hbar}\int d^4x_1 d^4x_1' G^0_{\alpha\lambda}(x,x_1)U(x_1,x_1')_{\lambda\lambda',\mu\mu'}G^0_{\mu\mu'}(x_1',x_1')G^0_{\lambda'\beta}(x_1,y) = \\
&= -\frac{i}{\hbar}\int d^4x_1 d^4x_2 G^0_{\alpha\lambda}(x,x_1)U(x_1,x_2)_{\lambda\lambda',\mu\mu'}G^0_{\mu\mu'}(x_2,x_2)G^0_{\lambda'\beta}(x_1,y) = \\
&= -\frac{i}{\hbar}\int d^4x_1 G^0_{\alpha\lambda}(x,x_1)\left[\int d^4x_2 U(x_1,x_2)_{\lambda\lambda',\mu\mu'}G^0_{\mu\mu'}(x_2,x_2)\right]\times \\
&\times G^0_{\lambda'\beta}(x_1,y) = \\
&= -\frac{i}{\hbar}\int d^4x_1 d^4x_1' G^0_{\alpha\lambda}(x,x_1)\delta^4(x_1-x_1')\times \\
&\times\left[\int d^4x_2 U(x_1',x_2)_{\lambda\lambda',\mu\mu'}G^0_{\mu\mu'}(x_2,x_2)\right]G^0_{\lambda'\beta}(x_1',y)
\end{aligned}$$

Quindi

$$\Sigma_{\lambda\lambda'}(x_1,x_1') = -\frac{i}{\hbar}\delta^4(x_1-x_1')\int d^4x_2 U(x_1',x_2)_{\lambda\lambda',\mu\mu'}G^0_{\mu\mu'}(x_2,x_2)$$

NB. si ricordi che gli indici ripetuti sono sommati

3.10 De energia

Precedentemente si era visto che

$$E = \pm\frac{i}{2}\frac{V}{(2\pi)^4}\lim_{\eta\to 0^+}\int d\vec{k}\int_{-\infty}^{\infty} d\omega e^{i\omega\eta}\left(\hbar\omega + \frac{\hbar^2\vec{k}^2}{2m}\right)trG(\vec{k},\omega)$$

ovvero, tramite il teorema di Pauli

$$E - E_0 = \pm\frac{i}{2}\frac{V}{(2\pi)^4}\lim_{\eta\to 0^+}\int_0^1\frac{d\lambda}{\lambda}\int d\vec{k}\int_{-\infty}^{\infty} d\omega e^{i\omega\eta}\left(\hbar\omega - \frac{\hbar^2\vec{k}^2}{2m}\right)trG^{\lambda}(\vec{k},\omega)\ .$$

Elaboriamo la prima formula per fermioni $\left(\epsilon^0_{\vec{k}} = \frac{\hbar^2\vec{k}^2}{2m}\right)$

$$\begin{aligned}
E &= -iV(2S+1)\lim_{\eta\to 0^+}\int\frac{d^4k}{(2\pi)^4}e^{i\omega\eta}\frac{\hbar}{2}\left[\frac{\hbar\omega+\epsilon^0_{\vec{k}}}{\hbar\omega-\epsilon^0_{\vec{k}}-\hbar\Sigma^*(\vec{k},\omega)}\right] = \\
&= -iV(2S+1)\lim_{\eta\to 0^+}\int\frac{d^4k}{(2\pi)^4}e^{i\omega\eta}\frac{\hbar}{2}\times
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&\times \quad \left[\frac{\hbar\omega - \epsilon^0_{\vec{k}} - \hbar\Sigma^*(\vec{k},\omega) + 2\epsilon^0_{\vec{k}} + \hbar\Sigma^*(\vec{k},\omega)}{\hbar\omega - \epsilon^0_{\vec{k}} - \hbar\Sigma^*(\vec{k},\omega)}\right] = \\
&= \quad -iV(2S+1)\lim_{\eta\to 0^+}\int \frac{d^4k}{(2\pi)^4} e^{i\omega\eta}\left\{\frac{\hbar}{2} + \left[\epsilon^0_{\vec{k}} + \frac{\hbar}{2}\Sigma^*(\vec{k},\omega)\right] G(\vec{k},\omega)\right\}
\end{aligned}$$

e finalmente

$$E = -iV(2S+1)\lim_{\eta\to 0^+}\int \frac{d^4k}{(2\pi)^4} e^{i\omega\eta}\left[\epsilon^0_{\vec{k}} + \frac{\hbar}{2}\Sigma^*(\vec{k},\omega)\right] G(\vec{k},\omega)$$

poiché

$$\begin{aligned}
&\lim_{\eta\to 0^+}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{d\omega}{2\pi}e^{i\omega\eta} \equiv \lim_{\eta\to 0^+}\left[\lim_{\epsilon\to 0^+}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{d\omega}{2\pi}e^{-\epsilon|\omega|}e^{i\omega\eta}\right] = \\
&= \lim_{\eta\to 0^+}\left[\lim_{\epsilon\to 0^+} -\frac{1}{\pi}\frac{\epsilon}{\eta^2+\epsilon^2}\right] = 0
\end{aligned}$$

Analogamente si puó dimostrare, sempre per fermioni, che

$$\begin{aligned}
E - E_0 \quad &= \quad -iV(2S+1)\lim_{\eta\to 0^+}\int_0^1 \frac{d\lambda}{\lambda}\int \frac{d^4k}{(2\pi)^4} e^{i\omega\eta}\hbar \times \\
&\times \quad \left[\frac{\hbar\omega - \epsilon^0_{\vec{k}}}{\hbar\omega - \epsilon^0_{\vec{k}} - \hbar\Sigma^{*(\lambda)}(\vec{k},\omega)}\right] = \\
&= \quad -iV(2S+1)\lim_{\eta\to 0^+}\int_0^1 \frac{d\lambda}{\lambda}\int \frac{d^4k}{(2\pi)^4} e^{i\omega\eta}\frac{\hbar}{2}\Sigma^{*(\lambda)}(\vec{k},\omega)G^{(\lambda)}(\vec{k},\omega)
\end{aligned}$$

Valutiamo ora l' energia con la $\Sigma^{*(1)}(\vec{k})$ e $S = 1/2$

$$\begin{aligned}
E \quad &= \quad -i2V\int \frac{d\vec{k}}{(2\pi)^3}\left[\frac{\hbar^2\vec{k}^2}{2m} + \frac{\hbar}{2}\Sigma^{*(1)}(\vec{k},\omega)\right]\lim_{\eta\to 0^+}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{d\omega}{2\pi}e^{i\omega\eta} \times \\
&\times \quad \left[\frac{\theta(k-k_F)}{\omega - \omega_{\vec{k}} - \Sigma^{*(1)}(\vec{k}) + i\eta} + \frac{\theta(k_F-k)}{\omega - \omega_{\vec{k}} - \Sigma^{*(1)}(\vec{k}) - i\eta}\right] = \\
&= \quad 2V\int \frac{d\vec{k}}{(2\pi)^3}\left[\frac{\hbar^2\vec{k}^2}{2m} + \frac{\hbar}{2}\Sigma^{*(1)}(\vec{k},\omega)\right]\theta(k_F-k) \\
&= \quad -2V\left\{\frac{4\pi}{(2\pi)^3}\frac{\hbar^2}{2m}\frac{k_F^5}{5} + \frac{1}{2}\int \frac{d\vec{k}}{(2\pi)^3}\theta(k_F-k) \times \right. \\
&\times \quad \left.\left[nV_0(0) - \frac{1}{(2\pi)^3}\int d\vec{k'}\left(V_0(\vec{k}-\vec{k'}) + 3V_1(\vec{k}-\vec{k'})\right)\theta(k_F-k')\right]\right\} =
\end{aligned}$$

$$
\begin{aligned}
&= V\left\{\frac{3}{5}\frac{\hbar^2 k_F^2}{2m}\frac{k_F^3}{3\pi^2}+\frac{1}{2}\frac{k_F^3}{3\pi^2}nV_0(0)+\right. \\
&- \left.\int\frac{d\vec{k}}{(2\pi)^3}\int\frac{d\vec{k'}}{(2\pi)^3}\left[V_0(\vec{k}-\vec{k'})+3V_1(\vec{k}-\vec{k'})\right]\theta(k_F-k)\theta(k_F-k')\right\}
\end{aligned}
$$

e quindi *l' energia per particella sará*

$$
\begin{aligned}
&\frac{E}{N}=\frac{3}{5}\frac{\hbar^2k_F^2}{2m}+\frac{1}{2}nV_0(0)+ \\
&- \frac{1}{n}\int\frac{d\vec{k}}{(2\pi)^3}\int\frac{d\vec{k'}}{(2\pi)^3}\left[V_0(\vec{k}-\vec{k'})+3V_1(\vec{k}-\vec{k'})\right]\theta(k_F-k)\theta(k_F-k')
\end{aligned}
$$

Trattiamo solo l' exchange ponendo $\vec{k}=\vec{p}+\vec{q}/2$, $\vec{k'}=\vec{p}-\vec{q}/2$

$$
\begin{aligned}
&E_{exch}=-\frac{1}{n}\int\frac{d\vec{q}}{(2\pi)^3}\int\frac{d\vec{p}}{(2\pi)^3}\left(V_0(q)+3V_1(q)\right)\times \\
\times\ &\theta(k_F-|\vec{p}+\frac{q}{2}|)\theta(k_F-|\vec{p}-\frac{q}{2}|) \\
=\ &-\frac{1}{n}\int\frac{d\vec{q}}{(2\pi)^3}\frac{1}{(2\pi)^3}\frac{4}{3}\pi k_F^3\left(1-\frac{3}{2}\frac{q}{2k_F}+\frac{1}{2}\left(\frac{q}{2k_F}\right)^3\right)\times \\
\times\ &\theta(1-\frac{q}{2k_F})\left(V_0(q)+3V_1(q)\right) \\
=\ &-\frac{1}{n}\frac{4\pi}{8\pi^3}\frac{4\pi}{8\pi^3}\frac{k_F^3}{3}\int_0^{2k_F}dqq^2(V_0(q)+3V_1(q))\left(1-\frac{3}{2}\frac{q}{2k_F}+\frac{1}{2}\left(\frac{q}{2k_F}\right)^3\right) \\
=\ &-\frac{1}{4\pi^2}8k_F^3\int_0^1 dss^2\left(V_0(2k_Fs)+3V_1(2k_Fs)\right)\left(1-\frac{3}{2}s+\frac{1}{2}s^3\right) \\
=\ &-6n\int_0^1 dss^2\left(V_0(2k_Fs)+3V_1(2k_Fs)\right)\left(1-\frac{3}{2}s+\frac{1}{2}s^3\right)
\end{aligned}
$$

Electron gas (il direct si cancella con il background)

$$
\begin{aligned}
\frac{E}{N} &= \frac{3}{5}\frac{\hbar^2k_F^2}{2m}-6\frac{k_F^3}{3\pi^2}\frac{4\pi e^2}{4k_F^2}\int_0^1 ds\left(1-\frac{3}{2}s+\frac{1}{2}s^3\right)= \\
&= \frac{3}{5}\frac{\hbar^2k_F^2}{2m}-4\pi e^2\frac{3}{8}\frac{k_F}{2\pi^2}=\frac{3}{5}\frac{\hbar^2k_F^2}{2m}-\frac{3}{4\pi}e^2k_F
\end{aligned}
\tag{3.31}
$$

NB. la terza riga della formula (3.31) puó anche scriversi

$$
E_{exch}=-\frac{1}{(2\pi)^2}\int_0^{2k_F}dqq^2\left(V_0(q)+3V_1(q)\right)\left(1-\frac{3}{2}\frac{q}{2k_F}+\frac{1}{2}\left(\frac{q}{2k_F}\right)^3\right)
$$

Capitolo 4

Gas di elettroni degenere

Per illustrare l' utilitá del formalismo della seconda quantizzazione consideriamo un gas di elettroni interagenti, racchiusi all' interno di una distribuzione uniforme di cariche positive (*background*) tale da assicurare la neutralitá del sistema complessivo. Questo modello puó descrivere, in prima approssimazione, un metallo o plasma; nel sstema fisico reale le cariche positive sono localizzate nei nuclei degli ioni positivi che fanno altresí parte del metallo o del plasma e nella dinamica del sistema anche il loro moto andrebbe tenuto in considerazione; tuttavia gli ioni positivi sono molto piú pesanti degli elettoni ed é ragionevole trascurare del tutto il loro moto. Piú drastica, invece, é l' ipotesi di background distribuito uniformemente (modello a gelatina) specie nel caso dei metalli in cui, come é noto, gli ioni positivi sono ben localizzati all' interno del reticolo cristallino.

Per studiare le proprietá che ci interessano possiamo immaginare che il sistema sia racchiuso in un cubo di lato L, prendendo poi il limite per $L \to \infty$ alla fine del calcolo. In un mezzo infinito uniforme tutte le proprietá fisiche devono essere invarianti per traslazioni spaziali; ció suggerisce l' uso di condizioni al contorno periodiche per le fz. d' onda di particella singola, che sceglieremo come onde piane normalizzate in scatola, ossia

$$\Psi_{\vec{k},\lambda}(\vec{x}) = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{x}} \chi_\lambda \tag{4.1}$$

dove $V \equiv L^3$ é il volume della scatola e χ_λ sono le due autofunzioni della terza componente dello spin elettronico lungo una direzione z scelta arbitrariamente:

$$\chi_+ = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \qquad \chi_- = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \tag{4.2}$$

Le condizioni di periodicitá delle funzioni d' onda sui lati del volume che contiene il sistema determinano le componenti del vettore d' onda $\vec{k}$, che possono assumere solo i valori

$$k_i = \frac{2\pi}{L} n_i \quad (i = x, y, z \; ; \; n_i = 0, \pm 1, \pm 2, \ldots) \tag{4.3}$$

Trascurando, come si é detto, l' energia cinetica degli ioni positivi, l' Hamiltoniana totale del sistema si puó scrivere come somma di tre termini,

$$H = H_{el} + H_b + H_{el-b} \tag{4.4}$$

dove

$$H_{el} = \sum_{i=1}^{N} \frac{p_i^2}{2m} + \frac{1}{2} e^2 \sum_{i \neq j} \frac{e^{-\mu |\vec{r}_i - \vec{r}_j|}}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|} \tag{4.5}$$

é l' Hamiltoniana degli elettroni, somma delle loro energie cinetiche e dell' energia di interazione (repulsiva) fra coppie di elettroni, scritta nella forma di un potenziale Coulombiano schermato (il fattore $e^{-\mu |\vec{r}_i - \vec{r}_j|}$ toglie il raggio di azione effettivo della pura interazione Coulombina, che ha raggio di azione infinito); inoltre

$$H_b = \frac{1}{2} e^2 \int \int d\vec{x} d\vec{x'} \frac{n(\vec{x}) n(\vec{x'}) e^{-\mu |\vec{x} - \vec{x'}|}}{|\vec{x} - \vec{x'}|} \tag{4.6}$$

é l' energia del background positivo, la cui densitá é $n(\vec{x})$, e

$$H_{el-b} = -e^2 \sum_{i=1}^{N} \int d\vec{x} \frac{n(\vec{x}) e^{-\mu |\vec{x} - \vec{r}_i|}}{|\vec{x} - \vec{r}_i|} \tag{4.7}$$

é l' energia d' interazione fra gli eletroni e il background (gli elettroni, puntiformi, si suppongono localizzati nei punti $\vec{r}_i$). Si noti che gli integrali in H_b ed H_{el-b} sono definiti proprio grazie al fattore schermante $e^{-\mu |\vec{x} - \vec{x'}|}$, che ne assicura la convergenza; il limite $\mu \to 0$ (corrispondente alla pura interazione Coulombiana) si puó eventualmente fare alla fine del calcolo. In effetti la natura a lungo range dell' interazione Coulombiana fa sí che ciascuno dei tre termini nella (4.4) diverga nel limite *termodinamico* $N \to \infty$, $V \to \infty$ (ma con $n = \frac{N}{V}$ costante); tuttavia la neutralitá complessiva del sistema ci assicura che la somma di tali termini converge anche nel limite suddetto. La presenza del fattore di convergenza μ ci consente di trattare con quantitá matematiche ben definite e di eseguire esplicitamente la cancellazione di tali divergenze.

Nell' eq. (4.4) le uniche variabili dinamiche sono quelle riferentesi agli elettroni, poiché il background positivo é inerte.

Perció H_b é semplicemente un numero, che possiamo valutare facilmente se si assume che la densitá del background sia uniforme, cioé $n(\vec{x}) = \frac{N}{V}$; in tal caso

$$\begin{aligned} H_b &= \frac{1}{2}e^2\left(\frac{N}{V}\right)^2 \int\int d\vec{x}d\vec{x'}\frac{e^{-\mu|\vec{x}-\vec{x'}|}}{|\vec{x}-\vec{x'}|} \\ &= \frac{1}{2}e^2\left(\frac{N}{V}\right)^2 \int\int d\vec{x}d\vec{z}\frac{e^{-\mu z}}{z} = \frac{1}{2}e^2\frac{N^2}{V}\frac{4\pi}{\mu^2} \quad . \end{aligned} \tag{4.8}$$

Qui l' invarianza traslazionale si é usata per spostare l' origine delle coordinate nel cambiamento di variabile$\vec{x} - \vec{x'} \rightarrow \vec{z}$. La quantitá H_b/N diverge nel limite $\mu \rightarrow 0$ poiché il raggio infinito del potenziale Coulombiano fa sí che ogni elemento di carica del background interagisca con tutto il resto delle cariche.

In linea di principio H_{el-b} é un operatore di particella singola perché agisce su ciascun elettrone; tuttavia, data l' uniformitá del sistema in esame, possiamo nuovamente sfruttare l' invarianza traslazionale per calcolare l' integrale nella (4.7) e otteniamo cosí

$$H_{el-b} = -e^2\sum_{i=1}^{N}\frac{N}{V}\int d\vec{x}\frac{e^{-\mu|\vec{x}-\vec{r}_i|}}{|\vec{x}-\vec{r}_i|} = -e^2\sum_{i=1}^{N}\frac{N}{V}\int d\vec{z}\frac{e^{-\mu z}}{z}$$

ossia

$$H_{el-b} = -e^2\frac{N^2}{V}\frac{4\pi}{\mu^2} \tag{4.9}$$

per cui, di fatto, anche H_{el-b} é semplicemente un numero.

L' Hamiltoniana totale si riduce pertanto a

$$H = -\frac{1}{2}e^2\frac{N^2}{V}\frac{4\pi}{\mu^2} + H_{el} \tag{4.10}$$

e tutta la dinamica del sistema che ci interessa é contenuta in H_{el}.

Possiamo ora scrivere la (4.10) in seconda quantizzazione, facendo uso della fz. d' onda di particella singola (4.1) e degli operatori di creazione e distruzione di fermioni (gli elettroni).

Il termine cinetico implica un elemento di matrice

$$
\begin{aligned}
\langle \vec{k}_1\lambda_1|T|\vec{k}_2\lambda_2\rangle &= \frac{1}{2mV}\int d\vec{x}e^{-i\vec{k}_1\cdot\vec{x}}\chi^{\dagger}_{\lambda_1}(-\hbar^2\nabla^2)e^{i\vec{k}_2\cdot\vec{x}}\chi_{\lambda_2} \\
&= \frac{\hbar^2k_2^2}{2mV}\delta_{\lambda_1\lambda_2}\int d\vec{x}e^{i(\vec{k}_2-\vec{k}_1)\cdot\vec{x}} = \frac{\hbar^2k_2^2}{2m}\delta_{\lambda_1\lambda_2}\delta_{\vec{k}_1\vec{k}_2}
\end{aligned}
$$

dove si é usata la consueta definizione della delta di Kronecker

$$
\frac{1}{V}\int d\vec{x}e^{i(\vec{k}_2-\vec{k}_1)\cdot\vec{x}} = \delta_{\vec{k}_1\vec{k}_2}
$$

Pertanto l' operatore enegia cinetica diventa

$$
\hat{T} = \sum_{\vec{k},\lambda}\frac{\hbar^2k^2}{2m}\hat{a}^{\dagger}_{\vec{k}\lambda}\hat{a}_{\vec{k}\lambda} \quad ,
$$

che si puó interpretare come energia cinetica di ciascuno stato (o modo) moltiplicata per il corrispondente operatore numero di particelle.

Per l' energia potenziale l' elemento di matrice da calcolare é un pó piú complicato

$$
\begin{aligned}
&\langle \vec{k}_1\lambda_1\vec{k}_2\lambda_2|V|\vec{k}_3\lambda_3\vec{k}_4\lambda_4\rangle = \\
= \ & \frac{e^2}{V^2}\int\int d\vec{x}_1 d\vec{x}_2 e^{-i\vec{k}_1\cdot\vec{x}_1}\chi^{\dagger}_{\lambda_1}(1)e^{-i\vec{k}_2\cdot\vec{x}_2}\chi^{\dagger}_{\lambda_2}(2)\times \\
\times \ & \frac{e^{-\mu|\vec{x}_1-\vec{x}_2|}}{|\vec{x}-\vec{x}_2|}e^{i\vec{k}_3\cdot\vec{x}_1}\chi^{\dagger}_{\lambda_3}(1)e^{-i\vec{k}_4\cdot\vec{x}_2}\chi^{\dagger}_{\lambda_4}(2) \quad ,
\end{aligned}
$$

con il cambiamento di variabile $\vec{x} = \vec{x}_2$ e $\vec{y} = \vec{x}_1 - \vec{x}_2$ (che é lecito fare grazie alle proprietá di invarianza traslazionale del sistema), tale espressione si riduce a

$$
\begin{aligned}
\langle \vec{k}_1\lambda_1\vec{k}_2\lambda_2|V|\vec{k}_3\lambda_3\vec{k}_4\lambda_4\rangle &= \frac{e^2}{V^2}\int d\vec{x}e^{-i(\vec{k}_1+\vec{k}_2-\vec{k}_3-\vec{k}_4)\cdot\vec{x}} \\
&\times \int d\vec{y}e^{i(\vec{k}_3-\vec{k}_1)\cdot\vec{y}}\frac{e^{-\mu y}}{y}\delta_{\lambda_1\lambda_3}\delta_{\lambda_2\lambda_4}
\end{aligned}
$$

dove la delta di Cronecker degli indici di spin nasce dalla ortogonalitá delle funzioni d' onda di spin. Infine

$$\langle \vec{k}_1\lambda_1\vec{k}_2\lambda_2|V|\vec{k}_3\lambda_3\vec{k}_4\lambda_4\rangle = \frac{e^2}{V^2}\delta_{\lambda_1\lambda_3}\delta_{\lambda_2\lambda_4}\delta_{\vec{k}_1+\vec{k}_2,\vec{k}_3+\vec{k}_4}\frac{4\pi}{(\vec{k}_1-\vec{k}_3)^2+\mu^2} \tag{4.11}$$

Si noti che la δ degli impulsi rappresenta la conservazione dell' imlpuso totale in un sistema uniforme. L' Hamiltoniana totale si puó ora scrivere come

$$\begin{aligned}\hat{H} &= -\frac{1}{2}e^2\frac{N^2}{V}\frac{4\pi}{\mu^2}+\sum_{\vec{k},\lambda}\frac{\hbar^2k_2}{2m}\hat{a}^\dagger_{\vec{k}\lambda}\hat{a}_{\vec{k}\lambda}+\\ &+ \frac{e^2}{2V}\sum_{\vec{k}_1\vec{k}_2\vec{k}_3\vec{k}_4}\sum_{\lambda_1\lambda_2}\delta_{\vec{k}_1+\vec{k}_2,\vec{k}_3+\vec{k}_4}\frac{4\pi}{[(\vec{k}_1-\vec{k}_3)^2+\mu^2]}\hat{a}^\dagger_{\vec{k}_1\lambda_1}\hat{a}^\dagger_{\vec{k}_2\lambda_2}\hat{a}_{\vec{k}_4\lambda_2}\hat{a}_{\vec{k}_3\lambda_1}\end{aligned} \tag{4.12}$$

Come vedremo, la neutralitá elettrica del sistema rende possibile l' eliminazione di μ dall' Hamiltoniana; la conservazione dell' impulso limita, di fatto, la somma sui $\vec{k}_i$ a sole tre variabili indipendenti.

Possiamo allora fare il cambiamento di variabili

$$\begin{array}{ll}\vec{k}_1=\vec{k}+\vec{q} & \vec{k}_3=\vec{k}\\ \vec{k}_2=\vec{p}-\vec{q} & \vec{k}_4=\vec{p}\end{array} \tag{4.13}$$

in modo che la condizione $\vec{k}_1+\vec{k}_2=\vec{k}_3+\vec{k}_4$ resta soddisfatta ed inoltre si é chiamato $\hbar\vec{q}=\hbar(\vec{k}_1-\vec{k}_3)\equiv\hbar(\vec{k}_4-\vec{k}_2)$ l' *impulso trasferito* nella interazione tra due particelle. L' operatore di energia potenziale si puó dunque riscrivere nella forma

$$\frac{e^2}{2V}\sum_{\vec{k}\vec{p}\vec{q}}\sum_{\lambda_1\lambda_2}\frac{4\pi}{q^2+\mu^2}\hat{a}^\dagger_{\vec{k}+\vec{q},\lambda_1}\hat{a}^\dagger_{\vec{p}-\vec{q},\lambda_2}\hat{a}_{\vec{p}\lambda_2}\hat{a}_{\vec{k}\lambda_1}$$

che conviene riscrivere in due termini, corrispondenti a $\vec{q}=0$ e $\vec{q}\neq 0$ rispettivamente, ossia

$$\begin{aligned}&\frac{e^2}{2V}{\sum_{\vec{k}\vec{p}\vec{q}}}'\sum_{\lambda_1\lambda_2}\frac{4\pi}{q^2+\mu^2}\hat{a}^\dagger_{\vec{k}+\vec{q},\lambda_1}\hat{a}^\dagger_{\vec{p}-\vec{q},\lambda_2}\hat{a}_{\vec{p}\lambda_2}\hat{a}_{\vec{k}\lambda_1}+\\ +&\frac{e^2}{2V}\sum_{\vec{k}\vec{p}}\sum_{\lambda_1\lambda_2}\frac{4\pi}{\mu^2}\hat{a}^\dagger_{\vec{k}\lambda_1}\hat{a}^\dagger_{\vec{p}\lambda_2}\hat{a}_{\vec{p}\lambda_2}\hat{a}_{\vec{k}\lambda_1}\end{aligned} \tag{4.14}$$

dove il primo sulla sommatoria implica che si deve omettere il termine $\vec{q} = 0$. Il secondo termine si puó riscrivere, facendo uso delle regole di anticommutazione degli $\hat{a}$, come

$$\frac{e^2}{2V}\frac{4\pi}{\mu^2}\sum_{\vec{k}\lambda_1}\sum_{\vec{p}\lambda_2}\hat{a}^\dagger_{\vec{k}\lambda_1}\hat{a}_{\vec{k}\lambda_1}\left(\hat{a}^\dagger_{\vec{p}\lambda_2}\hat{a}_{\vec{p}\lambda_2} - \delta_{\vec{k}\vec{p}}\delta_{\lambda_1\lambda_2}\right)$$

ovvero, ricordando l' espressione dell' operatore numero di particelle

$$\frac{e^2}{2V}\frac{4\pi}{\mu^2}\left(\hat{N}^2 - \hat{N}\right) \quad . \tag{4.15}$$

D' altra parte, gli stati che stiamo considerando hanno un fissato numero di particelle, sicché possiamo sostituire $\hat{N}$ col suo autovalore N e il contributo (4.15) all' Hamiltoniana diventa semplicemente un numero:

$$\frac{e^2}{2V}\frac{4\pi}{\mu^2}N^2 - \frac{e^2}{2}\frac{4\pi}{\mu^2}\frac{N}{V} \tag{4.16}$$

Ora il termine della (4.16) cancella esattamente la somma di $H_{el-b} + H_b$ (vedi eq. (4.10)), confermando cosí la neutralitá elettrica del sistema, mentre il secondo rappresenta un' energia per particella pari a $-(2\pi e^2)/(V\mu^2)$, che si annulla facendo il limite per $V \to \infty$ in modo appropriato.[1] A questo punto é possibile porre dovunque $\mu = 0$, giacché i termini che restano sono ben definiti anche in tal limite. Ne segue che l' Hamiltoniana per un gas di elettroni contenuto in un background positivo uniforme é

$$\hat{H} = \sum_{\vec{k},\lambda}\frac{\hbar^2 k^2}{2m}\hat{a}^\dagger_{\vec{k}\lambda}\hat{a}_{\vec{k}\lambda} + \frac{e^2}{2V}{\sum_{\vec{k}\vec{p}\vec{q}}}'\sum_{\lambda_1\lambda_2}\frac{4\pi}{q^2}\hat{a}^\dagger_{\vec{k}+\vec{q},\lambda_1}\hat{a}^\dagger_{\vec{p}-\vec{q},\lambda_2}\hat{a}_{\vec{p}\lambda_2}\hat{a}_{\vec{k}\lambda_1} \tag{4.17}$$

dove si intende implicitammente il limite $N \to \infty$, $V \to \infty$ a densitá costante $n \equiv \frac{N}{V}$.

Introduciamo ora variabili adimensionali, essenzialmente in termini di lunghezze caratteristiche del sistema, e cioé la distanza media tra due particelle, r_0, tale che

$$\frac{V}{N} = \frac{4\pi}{3}r_0^3 \quad \text{(volume per particella)} \tag{4.18}$$

[1] Ció significa fare prima il limite per $L \to \infty$ e poi quello per $\mu \to 0$ (prendendo sempre $\mu^{-1} \ll L$).

e il raggio di Bohr:

$$a_0 = \frac{\hbar^2}{me^2} \quad ; \tag{4.19}$$

il loro rapporto (adimensionale) caratterizza, essenzialmente, la densitá del sistema:

$$r_s = \frac{r_0}{a_0} \quad .$$

Grandi r_s indicano un sistema con bassa densitá (distanza fra le particelle molto maggiore del raggio effettivo dell' interazione) piccoli r_s un sistema molto denso.

Assumendo r_0 come unitá di lunghezza, definiamo

$$\tilde{V} = \frac{V}{r_0^3} \qquad \tilde{k} = \frac{\vec{k}}{r_0^{-1}} \qquad \tilde{\vec{p}} = r_0\vec{p} \qquad \tilde{\vec{q}} = r_0\vec{q}$$

ottenendo cosí la forma adimensionale per l' Hamiltoniana,

$$\hat{H} \;=\; \frac{e^2}{a_0 r_s^2}\left[\sum_{\tilde{k},\lambda}\frac{1}{2}\tilde{k}^2\hat{a}^\dagger_{\tilde{k}\lambda}\hat{a}_{\tilde{k}\lambda} + \frac{r_s}{2\tilde{V}}\sum_{\tilde{k}\tilde{p}\tilde{q}}{}^{'}\sum_{\lambda_1\lambda_2}\frac{4\pi}{\tilde{q}^2}\hat{a}^\dagger_{\tilde{k}+\tilde{q},\lambda_1}\hat{a}^\dagger_{\tilde{p}-\tilde{q},\lambda_2}\hat{a}_{\tilde{p}\lambda_2}\hat{a}_{\tilde{k}\lambda_1}\right] \tag{4.20}$$

Si noti che il fattore e^2/a_0 ci dá le corrette dimensioni per l' Hamiltoniana, essendo

$$\frac{e^2}{2a_0} = 1Ry \simeq 13.6eV \tag{4.21}$$

(energia di legame dello stato fondamentale nell' atomo di H).

Dai due termini che compongono la (4.20) appare chiaro che l' energia potenziale diventa una piccola perturbazione quando $r_s \to 0$, cioé in corrispondenza al *limite di altissime densitá.*

Da un punto di vista perturbativo il termine di energia cinetica, risulta in tale limite, la parte dominante di $\hat{H}$, che si potrá separare i due parti

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_p \tag{4.22}$$

dove $\hat{H}_0$ é l' Hamiltoniana imperturbata

$$\hat{H}_0 = \sum_{\vec{k},\lambda} \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \hat{a}^\dagger_{\vec{k}\lambda} \hat{a}_{\vec{k}\lambda} \tag{4.23}$$

(coincidente con l' Hamiltoniana libera, che rappresenta un sistema di fermioni non interagenti) ed $\hat{H}_p$ é la (piccola) perturbazione

$$\hat{H}_p = \frac{e^2}{2V} \sum_{\vec{k}\vec{p}\vec{q}} \sum_{\lambda_1\lambda_2} \frac{4\pi}{q^2} \hat{a}^\dagger_{\vec{k}+\vec{q},\lambda_1} \hat{a}^\dagger_{\vec{p}-\vec{q},\lambda_2} \hat{a}_{\vec{p}\lambda_2} \hat{a}_{\vec{k}\lambda_1} \tag{4.24}$$

Incidentalmente questo giustifica a posteriori la scelta della base di fz. d' onda di particella singola (4.1) (giá scelta per via dell' invarianza traslazionale del sistema), infatti le onde piane sono autofunzioni di H_0 e l' energia dello stato fondamentale del sistema sará esprimibile con una serie perturbativa del tipo

$$\begin{aligned} E &= E^{(0)} + E^{(1)} + E^{(2)} + \ldots \equiv \\ &\equiv \langle F|\hat{H}_0|F\rangle + \langle F|\hat{H}_p|F\rangle + \langle F|\hat{H}_p \frac{1}{E^{(0)} - \hat{H}_0} \hat{H}_p|F\rangle + \ldots \end{aligned} \tag{4.25}$$

dove con $|F\rangle$ si é indicato lo stato fondamentale (imperturbato) del sistema, $E^{(0)}$ é l' energia dello stato fondamentale di un gas di Fermi libero (somma delle energie cinetiche delle sue particelle), $E^{(1)}$ é lo shift di energia al prim' ordine (nel potenziale di interazione) e cosí via.

Poiché il principio di esclusione di Pauli ci consente di situare al piú due elettroni in ciascun autostato dell' impulso, uno con spin su e l' altro con spin giú, lo stato fondamentale normalizzato $|F\rangle$ si ottiene quando vengano occupati tutti gli autostati dell' impulso $\hbar\vec{k}$ a partire da zero fino a un valore massimo (corrispondente all' impulso di Fermi $p_F = \hbar k_F$), ciascuno con due elettroni; questa scelta corrisponde, evidentemente, alla minima energia (cinetica) del gas di elettroni liberi. Il valore k_F si puó determinare in termini della densitá del sistema, imponendo che il valor medio dell' operatore numero totale di particelle nello stato fondamentale $|F\rangle$ coincida con il numero totale di particelle, N, che compongono il sistema:

$$N = \langle F|\hat{N}|F\rangle = \sum_{\vec{k},\lambda} \langle F|\hat{a}^\dagger_{\vec{k}\lambda} \hat{a}_{\vec{k}\lambda}|F\rangle = \sum_{\vec{k},\lambda} \theta(k_F - k) \tag{4.26}$$

dove $\theta(x)$ é la funzione a scalino

$$\theta(x) = \begin{cases} 1 & x > 0 \\ 0 & x < 0 \end{cases} \tag{4.27}$$

L' ultimo passaggio nella (4.26) discende dal fatto che $\hat{a}_{\vec{k}\lambda}$ applicato ad $|F\rangle$ (come pure l' $\hat{a}^\dagger_{\vec{k}\lambda}$ che opera su $\langle F|$) produce lo stato $|\ldots n_k - 1 \ldots\rangle$ se $|F\rangle$ contiene lo stato corrispondente al vettore di onda $\vec{k}$ (e quindi se $k \leq k_F$), mentre da zero in caso contrario. Finalmente la somma su $\vec{k}$ si puó piú agevolmente calcolare passando al limite in cui $\vec{k}$ diventa una variabile continua, cioé quando $V \to \infty$; ora, ricordando che $k_i = (2\pi n_i)/L$ ($n_i \equiv n_x, n_y, n_z$, intero) ciascuno stato $\vec{k}$ occupa, nello spazio dei vettori d' onda, un volume pari a $(2\pi)^3/L^3 \equiv (2\pi)^3/V$ e quindi la densitá di stati é $V/(2\pi)^3$; ora quando $V \to \infty$ la variazione di $\vec{k}$ dovuta a variazioni unitarie degli n_i é praticamente infinitesima, per cui si passa da somme su $\vec{k}$ a integrali come segue

$$\sum_{\vec{k}} f(\vec{k}) \overset{V\to\infty}{\to} \frac{V}{(2\pi)^3} \int d\vec{k} f(\vec{k}) \tag{4.28}$$

(essendo $(V d\vec{k})/(2\pi)^3$ la densitá degli stati fra $\vec{k} \div \vec{k} + d\vec{k}$).

La (4.26) diventerá allora

$$N = \frac{V}{(2\pi)^3} \int d\vec{k} \sum_\lambda \theta(k_F - k) \equiv \sum_\lambda \frac{V}{(2\pi)^3} 4\pi \int_0^{k_F} dk k^2 = V \frac{k_F^3}{3\pi^2} \tag{4.29}$$

(la somma su λ producendo soltanto un fattore 2), ossia

$$\frac{N}{V} = n = \frac{k_F^3}{3\pi^2} \quad . \tag{4.30}$$

formula che lega il numero d' onda di Fermi, k_F, alla densitá del sistema e resta immutata nel limite $N \to \infty$, $V \to \infty$.

Combinando la (4.30) con la (4.18) si ottiene l' espressione alternativa di k_F i unitá di r_0^{-1},

$$k_F = \left(\frac{9\pi}{4}\right)^{\frac{1}{3}} r_0^{-1} \equiv (\alpha r_0)^{-1} \qquad \text{con} \quad \alpha = \left(\frac{4}{9\pi}\right)^{\frac{1}{3}} \tag{4.31}$$

Il valor medio di $\hat{H}_0$ si puó calcolare nello stesso modo

$$\begin{aligned}
E^{(0)} &= \langle F|\hat{H}_0|F\rangle = \frac{\hbar^2}{2m}\sum_{\vec{k}\lambda} k^2 \langle F|\hat{n}_{\vec{k}\lambda}|F\rangle = \\
&= \frac{\hbar^2}{2m}\sum_{\vec{k}\lambda} k^2\theta(k_F - k) = \frac{\hbar^2}{2m}\sum_{\lambda}\frac{V}{(2\pi)^3}\int d\vec{k}k^2\theta(k_F-k) = \\
&= 2\frac{\hbar^2}{2m}\frac{V}{2\pi^2}\int_0^{k_F} dkk^4 = \frac{\hbar^2}{2m}\frac{V}{\pi^2}\frac{k_F^5}{5} = \frac{3}{5}\frac{\hbar^2 k_F^2}{2m}N \qquad (4.32)
\end{aligned}$$

o, equivalentemente,

$$E^{(0)} = N\frac{e^2}{2a_0}\frac{2.21}{r_s^2} \qquad (4.33)$$

Pertanto nel gas di Fermi libero (ove $E^{(0)}$ sarebbe tutta l' energia del sistema), l' energia per particella nello stato fondamentale, $E^(0)/N$, é 3/5 dell' energia di Fermi

$$\epsilon_F^0 = \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m} \qquad (4.34)$$

che, espressa in Rydberg, vale $2.21/r_s^2$.
Calcoliamo ora lo shift di energia al prim' ordine perturbativo

$$E^{(1)} \equiv \langle F|\hat{H}_p|F\rangle = \frac{e^2}{2V}\sum_{\vec{k}\vec{p}\vec{q}}{}^{'}\sum_{\lambda_1\lambda_2}\frac{4\pi}{q^2}\langle F|\hat{a}^\dagger_{\vec{k}+\vec{q},\lambda_1}\hat{a}^\dagger_{\vec{p}-\vec{q},\lambda_2}\hat{a}_{\vec{p}\lambda_2}\hat{a}_{\vec{k}\lambda_1}|F\rangle \qquad (4.35)$$

Per analizzare l' elemento di matrice occorre considerare che gli stati $\vec{p}\lambda_1$ e $\vec{k}\lambda_2$ devono essere occupati nello stato fondamentale $|F\rangle$ altrimenti gli operatori di distruzione che agiscono sulla destra darebbero zero; similmente gli stati $\vec{k}+\vec{q},\lambda_1$ e $\vec{p}-\vec{q},\lambda_2$ devono essere occupati in $|F\rangle$ (si noti che gli operatori $\hat{a}^\dagger$ sono operatori di distruzione quando agiscono alla sinistra su uno stato tipo bra, $\langle F|$); infine, poiché a destra e sinistra dell' elemento di matrice compare lo stato $|F\rangle$, si richiede che i due operatori di creazione riempano i buchi lasciati dai due operatori di distruzione, il che é possibile in due soli modi

$$(a)\left\{\begin{array}{rcl}\vec{k}+\vec{q},\lambda_1 &=& \vec{k},\lambda_1\\ \vec{p}-\vec{q},\lambda_2 &=& \vec{p},\lambda_2\end{array}\right. \quad , \quad (b)\left\{\begin{array}{rcl}\vec{p}-\vec{q},\lambda_2 &=& \vec{k},\lambda_1\\ \vec{k}+\vec{q},\lambda_1 &=& \vec{p},\lambda_2\end{array}\right. \qquad (4.36)$$

Il primo accoppiamento é proibito perché implicherebbe $\vec{q} = 0$ e tale termine é escluso dalla sommatoria, quindi l' elemento di matrice si riduce a

$$\begin{aligned} & \delta_{\vec{p},\vec{k}+\vec{q}}\delta_{\lambda_1\lambda_2}\langle F|\hat{a}^\dagger_{\vec{p},\lambda_1}\hat{a}^\dagger_{\vec{k},\lambda_2}\hat{a}_{\vec{p}\lambda_2}\hat{a}_{\vec{k}\lambda_1}|F\rangle = \\ = & -\delta_{\vec{p},\vec{k}+\vec{q}}\delta_{\lambda_1\lambda_2}\langle F|\hat{a}^\dagger_{\vec{p},\lambda_1}\hat{a}_{\vec{p}\lambda_2}\hat{a}^\dagger_{\vec{k},\lambda_2}\hat{a}_{\vec{k}\lambda_1}|F\rangle \end{aligned}$$

e la (4.35) diventa (sfruttando le δ per eseguire le somme su $\vec{p}$ e λ_2)

$$\begin{aligned} E^{(1)} &= -\frac{e^2}{2V}\sum_{\vec{k}\vec{q}}{}' \sum_{\lambda_1}\frac{4\pi}{q^2}\langle F|\hat{n}_{\vec{k}+\vec{q},\lambda_1}\hat{n}_{\vec{k}\lambda_1}|F\rangle = \\ &= -\frac{e^2}{2V}\sum_{\vec{k}\vec{q}}{}' \frac{4\pi}{q^2}\theta(k_F - |\vec{k}+\vec{q}|)\theta(k_F - k) = \\ &= -\frac{e^2}{V}\frac{4\pi V^2}{(2\pi)^6}\int d\vec{k}\int d\vec{q}\frac{1}{q^2}\theta(k_F - |\vec{k}+\vec{q}|)\theta(k_F - k) \quad ; \end{aligned} \tag{4.37}$$

il fattore 2 nel secondo passaggio nasce dalla somma sugli spin e la restrizione $\vec{q} \neq 0$ si puó ora trascurare (é un solo punto del dominio di integrazione ed ivi l' integrando non é singolare); conviene inoltre fare il cambiamento di variabili

$$\begin{aligned} &\vec{k} = \vec{p} - \vec{q}/2 \\ &\vec{k} + \vec{q} = \vec{p} + \vec{q}/2 \quad , \end{aligned} \tag{4.38}$$

che riduce la (4.37) alla forma simmetrica

$$E^{(1)} = -4\pi e^2\frac{V}{(2\pi)^6}\int d\vec{q}\frac{1}{q^2}\int d\vec{p}\theta(k_F - |\vec{p}+\frac{\vec{q}}{2}|)\theta(k_F - |\vec{p}-\frac{\vec{q}}{2}|) \tag{4.39}$$

La regione di integrazione per $\vec{p}$ é illustrata in fig. 4.1, sicché l' integrale in $d\vec{p}$ si riduce ad un semplice problema geometrico, col risultato

$$\begin{aligned} & \int d\vec{p}\;\theta(k_F - |\vec{p}+\frac{\vec{q}}{2}|)\theta(k_F - |\vec{p}-\frac{\vec{q}}{2}|) = \\ & = \frac{4\pi}{3}k_F^3\left(1 - \frac{3}{2}x + \frac{1}{2}x^3\right)\theta(1-x) \end{aligned} \tag{4.40}$$

Figura 4.1: Regione di integrazione

ove $x = q/2k_F$. [2] Inserendo la (4.40) nella (4.39) si trova infine

$$-\frac{e^2}{3}\frac{(4\pi)^2 V}{(2\pi)^6}4\pi 2k_F^4 \int_0^1 dx \left(1 - \frac{3}{2}x + \frac{1}{2}x^3\right)\theta(1-x)$$

$$E^{(1)} = -\frac{2}{3}\frac{e^2 V}{\pi^3}k_F^4\left(1 - \frac{3}{4} + \frac{1}{8}\right) = -\frac{e^2 V k_F^4}{4\pi^3} \equiv -\frac{3}{4\pi}\frac{e^2 k_F}{a_0}a_0 N$$

ossia

$$E^{(1)} = -\frac{e^2}{2a_0}\frac{3N}{2\pi\langle r_s} = -\frac{e^2}{2a_0}N\frac{0.916}{r_s} \tag{4.41}$$

che é lo shift di energia, al prim' ordine, in termini del parametro di densitá r_s.

Perció l' energia (per particella) dello stato fondamentale nel limite di alte densitá é data approssimamente (al prim' ordine perturbativo) da

$$\frac{E}{N} \overset{r_s\to 0}{=} \frac{e^2}{2a_0}\left[\frac{2.21}{r_s^2} - \frac{0.916}{r_s} + \ldots\right] \tag{4.42}$$

Si noti che l' enegia per particella é una quantitá finita (indipendente da N) il che dimostra che l' energia totale é una quantitá estensiva del sistema; nella (4.41) il primo termine é semplicemente l' energia cinetica

[2] Il volume del segmento sferico é dato dall' integrale (R= raggio dela sfera)

$$V = \pi\int x^2 dy = \pi R^3 \int_{\sin\theta_0}^1 \cos^2\theta d\sin\theta$$

dove nel nostro caso $R = k_F$ e $\sin\theta_0 = q/2k_F$. La (4.40) é il doppio di tale volume.

di un gas di Fermi di elettroni e diventa il termine dominante per $r_s \to 0$, cioé nel limite di densitá molto elevate. Il secondo termine, noto come *energia di scambio*, é negativo, esso nasce dal fatto che la valutazione dell' elemento di matrice nella (4.30) comprende due termini (corrispondenti alle due scelte. eq. (4.36)), quello diretto e quello di scambio, originati dall' antisimmetria della funzione d' onda. Come si é visto, il termine diretto nasce dall' interazione con $\vec{q} = 0$ e serve a cancellare esattamente $H_{el-b} + H_b$; tale cancellazione impone, successivamente, la restrizione $\vec{q} \neq 0$ e riflette la neutralitá elettrica del sistema. Il carattere attrattivo del termine di scambio é dovuto, come la sua stessa origine, al principio di esclusione di Pauli che, impedendo a due elettroni di stare nel medesimo stato spaziale e con spin paralleli, crea, per cosí dire, attorno ad ogni elettrone un vuoto di elettroni che si trovino nello stesso stato. I termini restanti dello sviluppo in serie di E/N sono detti, globalmente, *energia di correlazione*.

Limitandoci per ora ai termini contenuti nella (4.42) si puó vedere che E/N in funzione di r_s ha un minimo, corrispondente ad un' energia negativa, perció il sistema é legato.

per $r_s \to 0$ l' eq. (4.42) rappresenta l' esatta soluzione al problema, per valori piú grandi di r_s la nostra soluzione é solo approssimata, ma si puó far uso del principio variazionale di Rayleigh-Ritz, secondo il quale l' esatto stato fondamentale del sistema quantistico ha sempre un' energia inferiore a quella calcolata prendendo il valor medio dell' Hamiltoniana totale in un qualsiasi stato normalizzato, condizione che é certamente verificata nel nostro caso. Ne segue che anche la soluzione esatta per il nostro problema rappresenterá un sistema legato. Il minimo dell' eq. (4.42) si avrá in corrispondenza a

$$r_s = 4.83 \quad \Rightarrow \quad \left(\frac{E}{N}\right)_{min} = -0.095\frac{e^2}{2a_0} \tag{4.43}$$

Sebbene non vi sia ragione di pensare che la nostra soluzione sia corretta in tale regione, é interessante osservare che questi valori (in eV la $(E/N)_{min} = -1.29eV$) si prestano ad un buon confronto con i valori sperimentali per il sodio metallico in condizioni di laboratorio,

$$r_s = 3.96 \quad E/N = -1.13eV \tag{4.44}$$

dove l' energia di legame é il calore di vaporizzazione del metallo. Pertanto questo modello semplicissimo é in grado di spiegare una larga parte dell' energia di legame dei metalli. Si noti peró che nei metalli reali il background positivo deve essere localizzato secondo lo schema di un reticolo cristallino (modello di Wigner e Seitz).