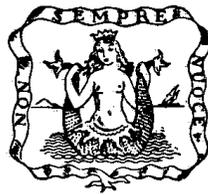


QUADERNI DI FISICA TEORICA

SIGFRIDO BOFFI

DA HEISENBERG A LANDAU

Introduzione alla fisica dei sistemi a molte particelle



BIBLIOPOLIS

Prefazione

Questo testo raccoglie gli appunti di lezione di un corso di Fisica Teorica inteso come introduzione allo studio dei sistemi di molte particelle. Il formalismo utilizzato si basa sulla meccanica quantistica non relativistica e perciò risale ai tempi gloriosi degli anni Venti del XX secolo in cui si venne delineando la nuova meccanica e la sua interpretazione, la cosiddetta interpretazione di Copenhagen, quale enunciata da Niels Hendrik David Bohr (1885–1962) nel 1927 alla luce del principio di indeterminazione di Werner Heisenberg (1901–1976). Il testo quindi rappresenta in un certo senso la continuazione ideale di un altro testo dello stesso autore, intitolato *Da Laplace a Heisenberg, un'introduzione alla meccanica quantistica e alle sue applicazioni*¹, che è stato per molti anni il manuale degli studenti del corso di Istituzioni di Fisica Teorica dell'Università di Pavia, illustrando il passaggio dalla fisica classica alla fisica quantistica e sviluppando il formalismo di base della meccanica quantistica non relativistica. Allora Laplace e Heisenberg erano stati considerati emblematici di due ambiti di spiegazione dei fenomeni, la fisica classica e la meccanica quantistica. Così ora Heisenberg e Landau emblematicamente rappresentano il punto di partenza quantistico, in ultima analisi caratterizzato dal principio di indeterminazione, e lo sviluppo di idee, durato quasi un secolo, che ne hanno permesso l'applicazione allo studio di un sistema di interesse fisico, con tutte le complicazioni e i problemi tecnici non facilmente risolvibili e legati, similmente a quanto avviene in fisica classica, al fatto di dover considerare molte particelle interagenti tra di loro.

¹ Le prime due edizioni del 1992 e del 1996, pubblicate per i tipi della Goliardica Pavese, sono esaurite. Il testo è ora a disposizione in edizione web in formato pdf nel sito seguente:
<http://www.pv.infn.it/~boffi/libro.html>.

Il settore della fisica dei sistemi di molte particelle è fortemente interdisciplinare e comprende quasi tutte le branche della fisica, in quanto il comportamento di ogni sistema viene determinato dalla dinamica dei suoi costituenti e presenta, grazie all'intreccio di gradi di libertà individuali e collettivi, caratteristiche spesso indipendenti dalla natura specifica delle particelle che lo compongono. In particolare, nel tempo si è rivelata molto utile l'idea che le eccitazioni elementari di un sistema siano riconducibili a gradi di libertà individuali efficaci, le cosiddette eccitazioni di quasi-particella, il cui uso sistematico ha permesso a Lev Davidovič Landau (1906–1968) di dare contributi fondamentali nella teoria della superconduttività, dei liquidi di Fermi e del diamagnetismo ². Per questi studi, e in particolare quelli sull'elio liquido, Landau fu insignito del premio Nobel per la Fisica nel 1962. Ma molte delle sue idee hanno fruttificato negli anni fino al recente conferimento del Premio Nobel per la Fisica del 2003 ad Alexei A. Abrikosov (n. 1928), Vitaly L. Ginzburg (n. 1916) e Anthony J. Leggett (n. 1938) per i loro contributi pionieristici alla teoria dei superconduttori e dei superfluidi.

La comunità di fisici che si occupa di sistemi di molte particelle, la cosiddetta *fisica dei many-body*, ha sempre avuto attenzione ai concetti e ai metodi teorici generali che intervengono nell'interpretazione del comportamento di un qualsiasi sistema composito. Per questo nel 1983 fu istituita la Medaglia Feenberg come riconoscimento del contributo consolidato di un autore al progresso della fisica dei sistemi di molte particelle: Eugene Feenberg (1906–1977) fu uno dei pionieri nell'applicare la meccanica quantistica non relativistica allo studio realistico dei nuclei atomici e dei fluidi quantistici. Nel 1985 la prima Medaglia Feenberg fu assegnata a David Pines per i suoi studi sui liquidi di Fermi normali e per i suoi contributi in generale nello studio delle eccitazioni nei solidi. Successivamente fu assegnata nel 1987 a John Walter Clark per i suoi studi sulle correlazioni nei sistemi fermionici, nel 1989 a Malvin H. Kalos per aver sviluppato un metodo numerico basato sulla funzione di Green per risolvere il problema di molti fermioni, nel 1991 a Walter Kohn per il suo formalismo del funzionale di densità ³, nel 1994 a David M. Ceperley per lo sviluppo di metodi diffusivi nella soluzione dell'equazione di Schrödinger di un insieme di

² Quasi tutti gli scritti scientifici di Landau sono stati raccolti nel volume: *Collected Papers of L.D. Landau*, ed. D. ter Haar, Pergamon Press, Oxford, 1965.

³ Kohn per questo fu poi anche insignito del Premio Nobel per la Chimica nel 1998 insieme con John A. Pople, le cui tecniche numeriche hanno permesso l'applicazione del metodo di Kohn allo studio della densità elettronica di grosse molecole.

fermioni, nel 1997 a Lev Petrovič Pitaevskii per i suoi studi teorici sulla condensazione di Bose-Einstein, nel 1999 al già citato Anthony J. Leggett per i suoi contributi nel chiarire le proprietà superfluide del liquido di ^3He e nell'esplorazione dei condensati atomici di Bose-Einstein. Infine nel 2001 la medaglia fu attribuita a Philippe Nozières per aver dato base microscopica alla teoria di Landau dei liquidi di Fermi normali.

I nomi di tutti questi autori, insieme con altri, torneranno di volta in volta nel corso del libro quando verranno toccati gli argomenti di cui si sono occupati.

L'impostazione del testo riflette il desiderio di fornire i metodi generali per lo studio di sistemi di fermioni e bosoni sia a temperatura zero, sia a temperatura finita. Punto di partenza sono i modelli a particelle indipendenti passati in rassegna nel primo capitolo e il privilegio che assume la matrice densità a un corpo nel descrivere un sistema di molti corpi. Ciò porta a studiare in generale nel secondo capitolo le proprietà matematiche delle matrici densità ridotte. Con lo sviluppo della seconda quantizzazione nel terzo capitolo inizia più propriamente lo studio degli stati eccitati di un sistema composito e la sua risposta alle sollecitazioni esterne. Dopo una digressione matematica nel quarto capitolo sul metodo del risolvete per la risoluzione di equazioni differenziali con una pedagogica applicazione al caso dell'oscillatore armonico, vengono discusse la funzione di Green di particella singola nel quinto capitolo e la risposta lineare nel sesto. Infine nell'ultimo capitolo sono presentate possibili estensioni del formalismo e una rassegna dei metodi di calcolo numerico utilizzati in fisica dei *many-body*.

Un particolare ringraziamento va all'amico Franco Davide Pacati per alcuni utili suggerimenti riguardanti una prima stesura di questo testo.

INDICE

I	- MODELLI A PARTICELLE INDIPENDENTI	1
	1.1. Quantizzazione di un sistema di molte particelle	1
	1.1.1. Particelle non interagenti	3
	1.1.2. Bosoni e fermioni	9
	1.1.3. Interazione residua	13
	1.1.4. Gas di Fermi	13
	1.1.5. Modello di Thomas–Fermi	16
	1.2. Il metodo di Hartree	19
	1.2.1. Hamiltoniana di Hartree	22
	1.2.2. Soluzione iterativa	24
	1.2.3. Un caso particolare	25
	1.3. Il metodo di Hartree–Fock	29
	1.3.1. Alcuni risultati	34
	1.3.2. Costruzione degli stati eccitati	36
	1.3.3. Teorema di Koopmans	38
	1.3.4. Teorema di Brillouin	39
	1.3.5. Matrice densità a un corpo	41
	1.4. Altri criteri per un modello a particelle indipendenti	44
	1.4.1. Il criterio della migliore sovrapposizione	45
	1.4.2. Il criterio della migliore densità	49
	1.4.3. Un caso particolare	52
	1.5. Formalismo del funzionale di densità	54
II	- MATRICI DENSITÀ	60
	2.1. Casi puri e casi miscela	60
	2.2. Operatore densità	64

2.2.1. Sistemi in equilibrio termodinamico con l'ambiente	69
2.2.2. Riduzione dei gradi di libertà	71
2.3. Matrici densità ridotte	73
2.3.1. Matrici densità ridotte di ordine 1 e 2	78
2.3.2. Matrici densità ridotte di ordine 1 e 2 per il gas di Fermi	79
2.4. Funzioni naturali	82
2.5. Sviluppo naturale di una funzione di più variabili	84
2.5.1. Limiti superiori agli autovalori delle matrici densità ridotte	88
2.5.2. Un limite allo spopolamento massimo degli orbitali	92
2.6. N -rappresentabilità	95
2.6.1. N -rappresentabilità delle matrici densità ridotte di ordine 1	96
2.6.2. N -rappresentabilità delle matrici densità ridotte di ordine 2	98
2.7. Matrici densità e stati del sistema	100
2.7.1. Energia dello stato fondamentale	101
2.7.2. Determinazione diretta della matrice densità	103
III - SECONDA QUANTIZZAZIONE	107
3.1. Spazio di Fock	107
3.2. Il campo di Schrödinger	113
3.3. Le osservabili in seconda quantizzazione	118
3.3.1. Operatori a un corpo	119
3.3.2. Operatori a due corpi	122
3.3.3. Matrici densità ridotte	124
3.4. Insieme di fermioni liberi	126
3.4.1. La trasformazione canonica di Bogoliubov–Valatin	129
3.4.2. La descrizione di un sistema mediante stati di quasi-particella	131
3.5. Il gas degenere di elettroni	134
3.6. Il teorema di Wick	140
3.6.1. Alcuni esempi d'uso del teorema di Wick	142
3.7. Il metodo di Hartree–Fock	145
3.8. Il metodo BCS	147
3.9. Approssimazione di Tamm–Dancoff	152
3.10. Approssimazione RPA	160
IV - IL RISOLVENTE	167
4.1. Un problema di frontiera monodimensionale	167
4.2. Il risolvente per l'oscillatore armonico lineare	171

4.2.1. Oscillatore armonico forzato	171
4.2.2. Oscillatore armonico smorzato	174
4.2.3. Oscillatore armonico forzato in un mezzo viscoso	175
4.2.4. Condizioni di risonanza e proprietà della funzione di Green	177
4.3. Risolvente e spettro di un operatore	180
4.3.1. Il risolvente nella rappresentazione delle posizioni	184
4.3.2. La funzione di Green per la particella libera	188
4.3.3. La funzione di Green per l'elettrostatica	192
4.3.4. Equazione di Lippmann–Schwinger	193
4.4. Funzioni di Green dipendenti dal tempo	195
4.4.1. Il propagatore per la particella libera	198
V - FUNZIONE DI GREEN DI PARTICELLA SINGOLA	203
5.1. Definizioni	205
5.1.1. Significato fisico	207
5.1.2. Una proprietà	209
5.2. Rappresentazione di Lehmann e densità spettrale	209
5.2.1. Densità spettrale	213
5.2.2. Densità spettrale e numeri di occupazione	215
5.2.3. Funzione di Green per fermioni non interagenti	217
5.3. Valori medi, matrice densità e funzione di Green	219
5.3.1. Regola di somma per l'energia	223
5.4. Funzioni di Green per un sistema omogeneo	224
5.4.1. Funzione di Green per il gas di Fermi	228
5.4.2. Andamento asintotico per grandi $ \omega $	232
5.4.3. Eccitazioni elementari di un sistema omogeneo	233
5.4.4. Fluido di Fermi normale	238
VI - LA RISPOSTA DI UN SISTEMA	243
6.1. Risposta di particella singola	244
6.2. Equazione di moto per la funzione di Green di particella singola	249
6.2.1. Operatore di massa e equazione di Dyson	251
6.3. Funzione di Green di due particelle	254
6.4. Matrice densità a due corpi e funzione di Green di due particelle	259
6.4.1. Operatore di massa e approssimazione di Hartree–Fock	263
6.4.2. Massa efficace	265
6.5. Propagatore di polarizzazione	270
6.5.1. Funzione di Lindhard	272

6.6. Teoria della risposta lineare	277
6.6.1. Ammettenza	281
6.6.2. Relazioni di dispersione	282
6.7. Fattore di struttura dinamico	283
6.7.1. Relazione di dispersione e sezione d'urto	287
6.7.2. Fattore di struttura statico	289
6.7.3. Regola di somma di Coulomb	294
VII - METODI DI CALCOLO E POSSIBILI ESTENSIONI	297
7.1. Descrizione di interazione e teorema adiabatico	297
7.2. Sviluppo perturbativo e diagrammatico	302
7.2.1. Diagrammi nello spazio degli impulsi e equazione di Dyson	308
7.2.2. Interazione efficace e equazione di Bethe–Salpeter	312
7.3. Sistemi di bosoni	315
7.3.1. La condensazione di bosoni	317
7.3.2. La funzione di Green di particella singola per un sistema di bosoni	321
7.4. Estensione del formalismo a temperature finite	328
7.4.1. Funzione di Green libera	330
7.4.2. Funzioni di Green a tempi immaginari	331
7.5. Metodi numerici	336
7.5.1. Diagonalizzazione esatta	336
7.5.2. Il metodo Monte Carlo	339
7.5.3. Il metodo Monte Carlo variazionale	342
7.5.4. Metodi Monte Carlo basati sulla funzione di Green	347
7.5.5. Metodi Monte Carlo diffusivi	350
7.5.6. Metodi Monte Carlo basati sui cammini di integrazione	356
7.5.7. L'elio liquido	362
Appendice	373
Indice analitico	377