



SAPIENZA  
UNIVERSITÀ DI ROMA

## Confronto tra gli approcci variazionale e perturbativo per il calcolo delle proprietà dei sistemi di molti corpi

Facoltà di Scienze Matematiche Fisiche e Naturali  
Corso di Laurea Specialistica in Fisica

Candidata  
Angela Mecca  
Matricola 696270

Relatore  
Prof. Omar Benhar Noccioli

Anno Accademico 2011/ 2012



<b>Introduzione</b>	<b>v</b>
<b>1 L'approccio variazionale</b>	<b>1</b>
1.1 Funzioni d'onda correlate . . . . .	1
1.2 Espansione in cluster del valore di aspettazione dell'hamiltoniana . .	3
1.2.1 Espansione del denominatore . . . . .	3
1.2.2 Espansione del numeratore . . . . .	5
1.3 Rappresentazione diagrammatica . . . . .	7
1.3.1 Diagrammi connessi e irriducibili . . . . .	8
1.3.2 Classificazione topologia dei diagrammi irriducibili . . . . .	10
1.3.3 Regole per l'espansione diagrammatica della $g(r_{12})$ . . . . .	10
1.4 Formulazione generale dell'espansione in cluster . . . . .	12
1.4.1 Il valore di aspettazione dell'energia . . . . .	13
1.4.2 Il funzionale generatore . . . . .	14
1.5 Determinazione della funzione di correlazione . . . . .	16
1.5.1 Teoria delle perturbazioni nella base correlata . . . . .	18
1.6 Equazioni integrali per il calcolo della $g(r_{12})$ . . . . .	19
1.6.1 Equazioni HNC (Hyper-Netted Chain) . . . . .	19
1.6.2 Equazioni FHNC (Fermi Hyper-Netted Chain) . . . . .	21
<b>2 L'approccio perturbativo</b>	<b>23</b>
2.1 La teoria delle perturbazioni indipendenti dal tempo . . . . .	23
2.2 Il teorema di Goldstone . . . . .	25
2.2.1 Diagrammi connessi . . . . .	25
2.2.2 Le contrazioni di Wick . . . . .	27
2.2.3 Le integrazioni temporali . . . . .	29
2.3 I diagrammi di Goldstone . . . . .	29
2.4 Il metodo di Hartee Fock . . . . .	31
2.5 La formulazione di Brueckner, Bethe e Goldstone . . . . .	33
2.5.1 La matrice di reazione . . . . .	34
2.5.2 La teoria di Brueckner . . . . .	35
2.5.3 Espansione <i>Hole-line</i> . . . . .	37

2.6	Confronto con l'approccio variazionale . . . . .	40
<b>3</b>	<b>Il metodo variazionale nel formalismo dei <i>path integrals</i></b>	<b>43</b>
3.1	Il principio variazionale . . . . .	43
3.1.1	Il principio di Rayleigh-Ritz . . . . .	45
3.2	Metodo variazionale alternativo . . . . .	46
3.3	Determinazione della funzione peso . . . . .	48
3.4	Equivalenza delle formulazioni variazionali . . . . .	49
3.5	L'espansione perturbativa . . . . .	51
3.6	I diagrammi intermedi e le integrazioni temporali . . . . .	53
3.6.1	Il caso $\Delta = 0$ . . . . .	54
3.6.2	I diagrammi <i>ladder</i> . . . . .	54
	<b>Conclusioni</b>	<b>58</b>
<b>A</b>	<b>Descrizione dello stato fondamentale del gas di Fermi</b>	<b>60</b>
A.1	Determinante di Slater . . . . .	60
A.2	Matrice densità . . . . .	61
<b>B</b>	<b>Espansione irriducibile</b>	<b>65</b>
<b>C</b>	<b>Approssimanti e integrali di cluster</b>	<b>67</b>
<b>D</b>	<b>Equazioni FHNC</b>	<b>70</b>
<b>E</b>	<b>La matrice di reazione</b>	<b>72</b>
E.1	Processi di diffusione nel vuoto . . . . .	72
E.2	Derivazione dell'equazione di Bethe-Golstone . . . . .	74
<b>F</b>	<b>La funzione di partizione</b>	<b>76</b>
F.1	<i>Path integrals</i> . . . . .	76
F.2	Rotazione di Wick . . . . .	77
F.3	Le condizioni al bordo . . . . .	78
	<b>Elenco delle figure</b>	<b>80</b>
	<b>Bibliografia</b>	<b>82</b>

Descrivere un sistema quantistico a molti corpi in presenza di interazione risolvendone l'equazione di Schrödinger è un'operazione pressoché impossibile. Già in meccanica classica, infatti, per i problemi a molti corpi si conoscono soltanto soluzioni approssimate o si risolvono le relative equazioni del moto per via numerica. Le soluzioni esatte, tramite integrali primi, esistono soltanto per particolari condizioni del sistema. Nel mondo quantistico, a maggior ragione, è sufficiente un potenziale di interazione a due corpi per complicare il sistema e fare in modo che l'equazione di Schrödinger non sia risolvibile esattamente.

Un sistema quantistico di  $N$  particelle identiche non relativistiche, in interazione tramite un potenziale a due corpi è descritto da una hamiltoniana

$$H = \sum_{i=1}^N \left[ \frac{\mathbf{p}_i^2}{2m} + V(\mathbf{r}_i) \right] + \sum_{j>i=1}^N v(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j) . \quad (0.1)$$

Nel caso più generale in cui siano presenti gradi di libertà interni come lo spin,

$$H = \sum_{i=1}^N U(\mathbf{r}_i, \sigma_i) + \sum_{j>i=1}^N v(\mathbf{r}_i, \sigma_i, \mathbf{r}_j, \sigma_j) . \quad (0.2)$$

La presenza del potenziale a due corpi rende l'hamiltoniana non separabile in contributi di particelle indipendenti. Un buon punto di partenza per la descrizione di molti sistemi di questo tipo è l'approssimazione di Hartee-Fock, che conserva la descrizione a particelle indipendenti assumendo che ogni particella si muova in un potenziale autoconsistente dato dall'interazione media con tutte le altre particelle. Riducendo il problema a molti corpi a moto di singola particella in un campo medio, questo metodo ha fornito risultati molto utili per la descrizione del moto degli elettroni nell'atomo, come pure in fisica molecolare e in teoria dello stato solido. Inoltre, l'approssimazione di campo medio è alla base del modello a shell della struttura nucleare.

In alcuni sistemi, tuttavia, la correlazione tra le particelle gioca un ruolo fondamentale e l'approssimazione di campo medio non è più adeguata. È il caso di sistemi caratterizzati da interazioni con raggio di interazione molto maggiore della distanza media tra le particelle costituenti e, soprattutto, di sistemi con una interazione intensa e a corto raggio. L'esistenza di una interazione con un *core* fortemente repulsivo è una proprietà abbastanza comune del potenziale a due corpi che descrive la dinamica di molti sistemi, come i liquidi sia classici che quantistici e la materia

nucleare. In presenza in un potenziale *hard core* è impossibile definire un campo medio con il metodo di Hartee Fock, dal momento che gli elementi di matrice del potenziale divergono.

Una parametrizzazione molto usata per l'interazione di sistemi a più particelle è il potenziale di Lennard-Jones (LJ)

$$V_{LJ}(r) = 4\epsilon \left[ \left( \frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left( \frac{\sigma}{r} \right)^6 \right], \quad (0.3)$$

che presenta un termine repulsivo a corto raggio e un termine attrattivo a medie e lunghe distanze. Con una scelta opportuna dei parametri  $\sigma$  (estensione del *core* repulsivo) e di  $\epsilon$  (profondità della buca attrattiva) [1] il potenziale di Lennard Jones è in grado di descrivere le interazioni tra atomi di elio. L'elio liquido si presta molto bene allo studio del problema quantistico a molti corpi. È, infatti, l'unico esempio di fluido quantistico reale, poiché non cristallizza, come i sistemi classici, ma resta in fase liquida fino a temperature prossime allo zero assoluto<sup>1</sup>.

Nonostante l'interazione sia semplice, dipendendo soltanto dalla distanza interatomica, e sia ben nota, effetti macroscopici notevoli provengono dal comportamento quantistico e, soprattutto, dalla natura statistica dei due isotopi  $^3\text{He}$  (fermionico)  $^4\text{He}$  (bosonico). La proprietà di rimanere in fase liquida a temperature molto basse, infatti, è conseguenza della debole attrazione interatomica (elettroni in shell 1s chiusa) e della piccola massa atomica, che comporta grandi oscillazioni di punto zero, e il diverso comportamento dei due tipi di elio è determinato dalle leggi della statistica quantistica.

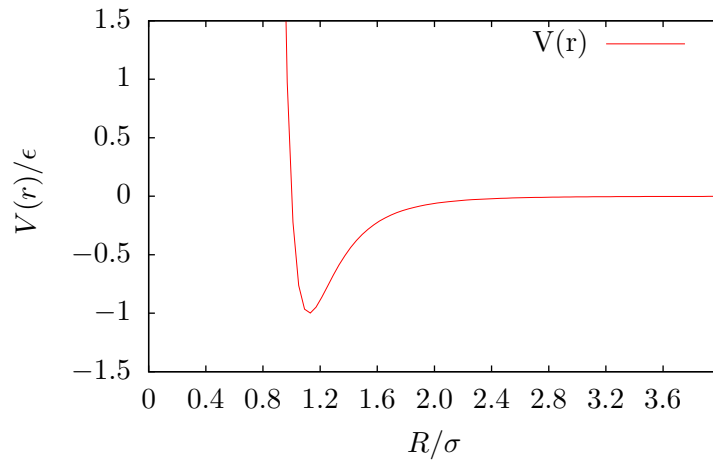
In Fig. 0.1 è riportato il potenziale LJ per il liquido di  $^4\text{He}$ . Confrontando le Fig. 0.1(a) e 0.1(b) si può notare come gli effetti di correlazione, rappresentati dalla funzione di distribuzione radiale  $g(r)$  si estendano ben oltre il raggio d'azione del potenziale di interazione. La definizione della  $g(r)$  verrà introdotta nel Capitolo 1; il suo significato fisico è direttamente legato alla probabilità di trovare due particelle a distanza relativa  $r$ .

La natura fortemente repulsiva dell'interazione a corto raggio non permette una trattazione perturbativa. I liquidi quantistici, infatti, sono stati trattati prevalentemente con tecniche basate su metodi variazionali, con lo scopo di includere gli effetti dell'interazione repulsiva direttamente all'interno della funzione d'onda. In quest'ottica si definiscono le funzioni correlate modificando le funzioni d'onda imperturbate attraverso l'azione di un fattore di correlazione che tenga conto dell'interazione [3], per esempio annullando la funzione d'onda nella regione del *core*.

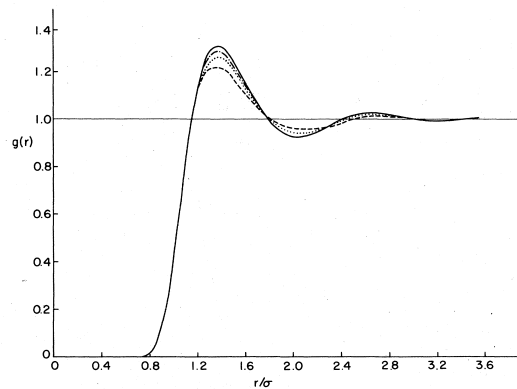
Il metodo variazionale interviene nella scelta del fattore di correlazione, che deve essere tale da minimizzare il valore di aspettazione dell'energia calcolato sulla funzione d'onda correlata dello stato fondamentale. Gli integrali multidimensionali che emergono dal calcolo di valori di aspettazione, dell'energia o di qualsiasi altro operatore a più corpi, possono essere calcolati tramite algoritmi Monte Carlo o procedendo con una espansione in cluster. Questo secondo metodo porta ad una rappresentazione diagrammatica dell'interazione a più particelle, particolarmente utile per selezionare i contributi rilevanti nel calcolo delle grandezze fisiche.

Nonostante l'interazione forte e singolare precluda ogni possibilità di espansione perturbativa in termini del potenziale, in sistemi diluiti si può includere l'effetto della

<sup>1</sup>  $^3\text{He}$  e  $^4\text{He}$  solidificano rispettivamente alle pressioni  $\approx 30\text{Atm}$  e  $\approx 25\text{Atm}$ .



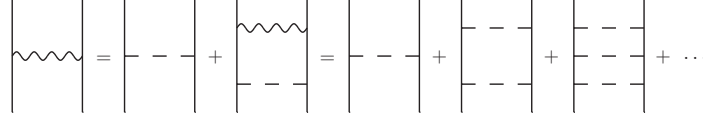
(a) Il potenziale Lennard Jones per l'elio liquido con parametri  $\sigma = 2.556\text{\AA}$  e  $\epsilon = 10.22K$  [1].



(b) La funzione di distribuzione radiale [2].

**Figura 0.1.** Il potenziale Lennard Jones (a) e la funzione di distribuzione radiale (b) per l'elio liquido. L'effetto delle correlazioni è misurato dalla deviazione della  $g(r)$  dal valore asintotico  $g(r) = 1$ .

repulsione all'interno della funzione d'onda che descrive il comportamento di una coppia di particelle nel mezzo e definire una interazione rinormalizzata che permette di ricorrere alla teoria delle perturbazioni. Seguendo i lavori di Brueckner, si può considerare un potenziale puramente repulsivo e calcolare l'ampiezza di scattering di una particella nel vuoto come somma di infiniti contributi (Fig. 0.2)



**Figura 0.2.** Rappresentazione grafica dell'interazione rinormalizzata.

L'idea di Brueckner è di esprimere le ampiezze di transizione in termini della matrice di reazione

$$G = v + v \frac{1}{E_0 - H_0} G \quad (0.4)$$

Gli elementi di matrice di  $G$ , dovendo descrivere ampiezze di scattering, rappresentano una quantità fisica ed è necessario che siano finiti anche in presenza di un potenziale divergente, sebbene la matrice stessa sia definita come somma di infiniti contributi del potenziale *hard core*.

A partire dalla teoria di Brueckner e dall'applicazione dei metodi della teoria dei campi (i diagrammi di Feynman) ai sistemi a molte particelle, Goldstone [4] ha sviluppato una soluzione formale esatta per il valore di aspettazione dell'energia di un sistema di fermioni interagenti, dimostrando contemporaneamente la cancellazione dei diagrammi disconnessi a tutti gli ordini della teoria delle perturbazioni. La soluzione formale permette di derivare la teoria di Brueckner dalla teoria delle perturbazioni indipendente dal tempo e ricorrere ad uno sviluppo in termini di diagrammi connessi nel calcolo dello stato fondamentale.

In questa Tesi verranno analizzati i diversi modi di descrivere i sistemi di molte particelle, cercando di metterli in relazione dal punto di vista sia fisico che formale.

Nel Capitolo 1 si discuterà l'approccio variazionale al problema a molti corpi basato sulla funzione variazionale proposta da Jastrow [3], descrivendo la teoria delle basi correlate (CBF) e l'espansione in cluster. Si illustrerà un metodo grafico per rappresentare l'espansione e si ricaverà un criterio di selezione dei diagrammi per sommare tutti i contributi rilevanti. Verrà infine applicato questo metodo alla derivazione dell'equazione integrale per la funzione di distribuzione radiale di un sistema bosonico (HNC), generalizzando il risultato al caso fermionico (FHNC).

Il Capitolo 2 sarà dedicato alla descrizione dell'approccio perturbativo. Verrà presentata la teoria di Brueckner insieme al lavoro di Goldstone volto ad ottenere una soluzione formale al problema di molti corpi in interazione in termini di diagrammi connessi. Si discuterà, inoltre, la teoria delle perturbazioni per l'interazione rinormalizzata tramite la matrice di reazione  $G$  e si metteranno a confronto le due descrizioni, variazionale e perturbativa.

Il Capitolo 3 sarà dedicato alla presentazione di un metodo alternativo che riesce contemporaneamente a generalizzare la teoria delle basi correlate e a riprodurre



all'interno di uno schema perturbativo i risultati acquisiti nella trattazione FHNC. Il metodo variazionale verrà applicato alla ricerca di una hamiltoniana  $H_0$  da utilizzare come funzione peso negli integrali sui cammini di Feynman. La scelta dell'hamiltoniana di prova sarà mirata a definire una funzione di partizione da cui ottenere, grazie ad un principio variazionale, l'energia dello stato fondamentale del sistema in accordo con le equazioni FHNC.

La funzione d'onda di un sistema quantistico non relativistico contiene tutte le informazioni necessarie alla descrizione del sistema stesso, ma risolvere l'equazione di Schrödinger per un sistema a molti corpi in interazione richiede necessariamente l'uso di uno schema di approssimazione. Inoltre, la presenza di un potenziale caratterizzato da un *core* fortemente repulsivo, al limite infinito, rende impossibile l'applicazione del metodo perturbativo *standard*. In questo capitolo vedremo come viene affrontato il problema a  $N$  corpi seguendo un approccio variazionale, concentrandoci sul caso di particelle fermioniche. La discussione sarà mirata alla descrizione di un sistema nel quale l'interazione tra i costituenti dipende solo dalla loro distanza relativa. Lo studio della materia nucleare richiede l'uso di un formalismo più generale, necessario per tenere conto del fatto che l'interazione dipende anche dai gradi di libertà interni dei nucleoni, cioè spin e spin isotopico.

## 1.1 Funzioni d'onda correlate

Il problema della descrizione di un'interazione fortemente repulsiva a brevi distanze e debolmente attrattiva a medie e grandi distanze, come nel caso dell'elio liquido ( ${}^3\text{He}$  e  ${}^4\text{He}$ ), di un gas di elettroni in un metallo o della materia nucleare, può essere affrontato partendo da un'idea abbastanza intuitiva: la presenza dell'interazione genera una regione di esclusione nello spazio delle configurazioni, in cui le particelle possono penetrare solo con probabilità molto bassa. Questo implica che, nella regione del *core* repulsivo, il modulo quadrato della funzione d'onda del sistema deve essere molto piccolo, o al limite annullarsi.

Nel metodo variazionale questa idea è sviluppata con la scelta di una funzione di prova,  $\Psi$ , fattorizzata in due componenti, una delle quali contiene, almeno in prima approssimazione, gli effetti dinamici dell'interazione, mentre l'altra descrive le simmetrie e la statistica del sistema.

La funzione d'onda totale viene quindi scritta come prodotto di un fattore di correlazione  $F(x_1, \dots, x_N)$ , simmetrico per scambio di particelle, e  $\Phi(x_1, \dots, x_N)$ , la

“funzione modello” che descrive lo stato di  $N$  particelle in assenza di correlazioni

$$\Psi(x_1, \dots, x_N) = F(x_1, \dots, x_N)\Phi(x_1, \dots, x_N). \quad (1.1)$$

L'hamiltoniana del sistema (0.2), scritta nel formalismo di prima quantizzazione, tiene conto dell'indistinguibilità delle particelle tramite la simmetria degli operatori, ma non distingue se le particelle sono fermioni o bosoni. L'informazione sulla natura statistica del sistema deve essere inserita a posteriori nella funzione d'onda, che, sotto lo scambio di coppie di particelle, sarà simmetrica per un sistema di bosoni e antisimmetrica per un sistema di fermioni.

Per un qualsiasi stato di un sistema fermionico la scelta più semplice per la funzione  $\Phi$  è un determinante di Slater costruito usando una base di funzioni d'onda individuali, ottenute dalla soluzione di un modello a particelle indipendenti.

$$\Phi(x_1, \dots, x_N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \det [\varphi_{\alpha_i}(x_i)]. \quad (1.2)$$

Le  $\varphi_{\alpha_i}(x_i)$  possono essere autofunzioni (normalizzate) dell'hamiltoniana libera oppure, secondo il metodo Hartee Fock, di una hamiltoniana che contiene un potenziale di singola particella, rappresentativo dell'interazione media con tutte le particelle del sistema. In entrambi i casi, assumendo che il sistema sia invariante per traslazioni, lo stato della  $i$ -esima particella è identificato dall'autovalore dell'impulso,  $\mathbf{k}_{\alpha_i}$ , e dalla proiezione dello spin lungo l'asse di quantizzazione,  $s_i$ . Nello stato fondamentale gli impulsi permessi vivono all'interno della sfera di Fermi di raggio  $k_F = (6\pi^2\rho/\nu)^{1/3}$ , dove  $\nu$  è la degenerazione associata ai gradi di libertà interni.

In un sistema di bosoni la funzione d'onda totale è data dalla combinazione simmetrica delle funzioni d'onda di singola particella. Per lo stato fondamentale, con tutte le particelle a impulso nullo, la funzione modello si riduce ad una costante

$$\Phi(x_1, \dots, x_N) = \Omega^{-N/2}, \quad (1.3)$$

dove  $\Omega$  è il volume di normalizzazione.

In generale, il fattore di correlazione deve soddisfare alcune proprietà indipendentemente dalla forma specifica, oltre a garantire che, in presenza di un potenziale fortemente repulsivo, il modulo quadrato della funzione d'onda sia piccolo nella regione del *core*:

- Deve essere simmetrico per scambio di coordinate di due particelle;
- Deve essere invariante per traslazioni del centro di massa e per rotazioni intorno al centro di massa;
- Deve essere invariante per inversione simultanea di tutte le coordinate;
- Deve soddisfare la proprietà di cluster, cioè l'effetto delle correlazioni deve svanire quando la distanza tra le particelle diventa sufficientemente grande. Se un sottoinsieme di particelle  $i_1 \dots i_p$  viene portato a grande distanza dalle rimanenti  $N - p$  particelle, il fattore di correlazione deve fattorizzare secondo la

$$F(x_1, \dots, x_N) = F_p(x_1, \dots, x_p)F_{N-p}(x_{p+1}, \dots, x_N). \quad (1.4)$$

Le proprietà richieste per il fattore di correlazione sono soddisfatte dall'autofunzione dell'hamiltoniana che descrive lo stato fondamentale di un sistema bosonico, soluzione dell'equazione di Schrödinger

$$H\Psi_B = E_B\Psi_B . \quad (1.5)$$

La funzione d'onda bosonica, infatti, rispetta le proprietà di simmetria e include al suo interno tutti gli effetti dell'interazione. Tuttavia è altrettanto impossibile descrivere in modo esatto lo stato di  $N$  particelle bosoniche. Un buon punto di partenza per la soluzione del problema a  $N$  corpi bosonico e, di conseguenza, dell'analogo problema fermionico è la scelta di un fattore di correlazione a due corpi che non dipende dagli stati di spin delle particelle ma soltanto dalla distanza relativa. La forma più comune, proposta da Bijil, Dingle e Jastrow e chiamata *ansatz* BDJ [3], è la

$$F = \prod_{j>i=1}^N f(r_{ij}) = \prod_{j>i=1}^N f(|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|) . \quad (1.6)$$

La proprietà di clustering per la  $F$  definita dalla (1.6) è soddisfatta richiedendo che il fattore di correlazione  $f$  tenda ad una costante, convenzionalmente scelta uguale a uno, per distanze tra le particelle che tendono all'infinito.

## 1.2 Espansione in cluster del valore di aspettazione dell'hamiltoniana

Scelta la funzione di prova  $\Psi$ , il problema centrale del metodo variazionale è il calcolo del valore di aspettazione dell'hamiltoniana

$$E = \frac{\langle \Psi | H | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle} . \quad (1.7)$$

Per un sistema a  $N$  corpi risolvere la (1.7) vuol dire calcolare integrali  $3N$  dimensionali, operazione semplice nel caso di particelle indipendenti ma non per particelle fortemente correlate. Seguendo il procedimento utilizzato nello sviluppo della funzione di partizione dei gas reali [5], il valore di aspettazione dell'energia può essere calcolato tramite un'espansione in cluster, cioè esprimendo  $E$  come somma di contributi associati a sottoinsiemi che coinvolgono un numero via via crescente delle  $N$  particelle. Ovviamente, il successo dell'espansione in cluster dipende dalla possibilità di stimare adeguatamente il valore dell'energia troncando la serie e calcolando esplicitamente solo pochi termini. Come vedremo, è però anche possibile individuare classi di termini dell'espansione il cui contributo può essere sommato a tutti gli ordini risolvendo delle equazioni integrali.

### 1.2.1 Espansione del denominatore

Per illustrare l'espansione in cluster è istruttivo, oltre che utile per gli sviluppi successivi, iniziare dalla normalizzazione dello stato correlato  $|\Psi\rangle$  che interviene nel denominatore del valore di aspettazione dell'energia (1.7). Sempre in previsione di quanto sarà discusso nel Capitolo 3 si introduce l'operatore  $\mathcal{U}$  che definisce lo stato correlato  $|\Psi\rangle = e^{\mathcal{U}/2} |\Phi\rangle$ . L'espansione del denominatore, dunque, diventa una

espansione del valore di aspettazione dell'operatore  $e^{\mathcal{U}}$  sullo stato di vuoto del gas fermionico

$$\langle \Psi | \Psi \rangle = \langle \Phi | e^{\mathcal{U}} | \Phi \rangle . \quad (1.8)$$

In questa notazione il collegamento con l'*ansatz* BDJ è dato dalla relazione

$$e^{\mathcal{U}} = F^2 = \prod_{i < j} f_{ij}^2 , \quad (1.9)$$

che vuol dire definire gli operatori a due corpi  $u_{ij} \equiv \ln |f(r_{ij})|^2$  e riscrivere

$$e^{\mathcal{U}} = e^{\sum_{i < j} u_{ij}} = \prod_{i < j} e^{u_{ij}} . \quad (1.10)$$

Il fattore di correlazione si può espandere in prodotto di un numero via via crescente di funzioni di correlazione a due punti, o funzioni di Meyer  $h(r_{ij})$

$$h(r_{ij}) \equiv |f(r_{ij})|^2 - 1 = e^{u_{ij}} - 1 . \quad (1.11)$$

Otteniamo così

$$\begin{aligned} F^2 &= \prod_{i < j} |f(r_{ij})|^2 \equiv \prod_{i < j} [1 + h(r_{ij})] \\ &= 1 + \sum_{i < j} h(r_{ij}) + \sum_{i < j} \sum_{k < l} h(r_{ij}) h(r_{kl}) + \dots \end{aligned} \quad (1.12)$$

Raggruppando tutti i contributi dei termini che coinvolgono lo stesso numero di particelle, si può scrivere la (1.12) nella forma più generale

$$\begin{aligned} e^{\mathcal{U}} &= 1 + \sum_{i < j} h_2(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j) + \sum_{i < j < k} h_3(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j, \mathbf{r}_k) + \dots \\ &= 1 + \sum_{p=2}^N \sum_{i_1 < \dots < i_p} h_p(\mathbf{r}_{i_1} \dots \mathbf{r}_{i_p}) , \end{aligned} \quad (1.13)$$

cioè come somma di funzioni "parziali", ciascuna delle quali descrive il contributo di un sottoinsieme di  $p$  particelle. Con lo sviluppo del fattore di correlazione, si può semplificare l'espressione analitica della (1.8), ottenendo<sup>1</sup>

$$\langle \Psi | \Psi \rangle = \int \prod_{i < j} |f(r_{ij})|^2 Tr\{|\Phi(x_1, \dots, x_N)|^2\} d\mathbf{r}_1 \dots \mathbf{r}_N . \quad (1.14)$$

Come dimostrato in Appendice A, il modulo quadro della funzione modello, cioè il prodotto dei determinanti di Slater  $\Phi$  e  $\Phi^\dagger$

$$|\Phi(x_1, \dots, x_N)|^2 \equiv \frac{1}{N!} \Delta_N(x_1, \dots, x_N) \quad (1.15)$$

<sup>1</sup>Nel seguito si indicheranno con  $x_i$  sia la posizione della particella  $i$ -esima,  $\mathbf{r}_i$ , sia i suoi gradi di libertà interni. Pertanto con il simbolo di integrazione  $\int dx_1 \dots dx_N$  si intenderà sia l'integrazione sulle coordinate che la somma sulle variabili discrete.

si può riscrivere in forma di determinante della matrice  $N \times N$  avente per elementi la matrice densità del sistema imperturbato nel suo stato fondamentale

$$\rho(x_i, x_j) = \sum_{\alpha \in F} \varphi_\alpha^*(x_i) \varphi_\alpha(x_j) , \quad (1.16)$$

dove  $\{F\}$  denota il mare di Fermi.

Tramite le funzioni  $\Delta_q(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_q)$ , definite dalla (A.15) in termini dei determinanti dei minori di ordine  $q$  della matrice  $N \times N$   $\rho(x_i, x_j)$ , e tenendo conto degli opportuni fattori combinatori<sup>2</sup> la (1.8) si può infine riscrivere come somma di termini dipendenti dai gradi di libertà di un numero crescente di particelle

$$\begin{aligned} \langle \Psi | \Psi \rangle &= 1 + \sum_{p=2}^N \int d\mathbf{r}_1 \dots d\mathbf{r}_p \left[ \sum_{i_1 < \dots < i_p} h_p(\mathbf{r}_{i_1} \dots \mathbf{r}_{i_p}) \frac{(N-p)!}{N!} \Delta_p(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_p) \right] \\ &= 1 + \frac{1}{2!} \int d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 h_2(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \Delta_2(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) + \\ &\quad + \frac{1}{3!} \int d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 d\mathbf{r}_3 h_3(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3) \Delta_3(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3) + \dots \end{aligned} \quad (1.17)$$

### 1.2.2 Espansione del numeratore

Applichiamo ora la tecnica dell'espansione in cluster al numeratore che compare nell'espressione del valore di aspettazione dell'hamiltoniana nello stato fondamentale correlato

$$\frac{\langle \Psi | H | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle} = \frac{\langle \Psi | T + V | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle} = \frac{\langle \Psi | -\sum_i \nabla_i^2 / 2m + \sum_{i < j} v(r_{ij}) | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle} , \quad (1.18)$$

dove  $m$  è la massa dei costituenti del sistema e, per semplicità, abbiamo assunto che il potenziale d'interazione dipenda solo dalla distanza relativa delle particelle interagenti.

Il calcolo del valore di aspettazione del potenziale non presenta particolari difficoltà. Per prima cosa, notiamo che ogni coppia di particelle si comporta allo stesso modo e il valore di aspettazione, normalizzato al numero di particelle, è dato dalla

$$\frac{1}{N} \langle V \rangle \equiv \frac{\langle \Psi | \sum_{i < j} v(r_{ij}) | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle} = \frac{N(N-1)}{2N} \frac{\langle \Psi | v(r_{12}) | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle} . \quad (1.19)$$

Esplicitando le variabili di integrazione otteniamo la

$$\frac{1}{N} \langle V \rangle = \frac{N(N-1)}{2N} \frac{\int dx_1 dx_2 v(r_{12}) \int dx_3 \dots dx_N |\Psi|^2}{\int dx_1 \dots dx_N |\Psi|^2} \quad (1.20)$$

che mostra come il valore di aspettazione si può riscrivere in termini delle funzione di distribuzione a due punti, ovvero della funzione di distribuzione radiale, definita come

$$g(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = g(r_{12}) = N(N-1) \frac{\sum_{\sigma_1 \sigma_2} \int dx_3 \dots dx_N |\Psi|^2}{\int dx_1 \dots dx_N |\Psi|^2} . \quad (1.21)$$

<sup>2</sup>  $\sum_{p=2}^N \sum_{i_1 < \dots < i_p} = N! / [(N-p)! p!]$  con  $p \geq 2$ .

Combinando le equazioni (1.20) e (1.21) otteniamo la (cfr. Appendice A)

$$\frac{1}{N} \langle V \rangle = \frac{1}{2} \rho \int d^3r v(r) g(r) . \quad (1.22)$$

In conclusione, il problema di calcolare  $\langle V \rangle$  è equivalente al calcolo della funzione di distribuzione radiale.

Nel caso dei liquidi quantistici, i risultati dei calcoli teorici della  $g(r)$  possono essere confrontati con i dati sperimentali tramite la funzione di struttura statica

$$S(k) = 1 + \rho \int d^3r [g(r) - 1] e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} , \quad (1.23)$$

quantità misurabile sperimentalmente con esperimenti di diffusione di raggi X e neutroni.

Per l'energia cinetica il calcolo del valore di aspettazione

$$\frac{1}{N} \langle T \rangle = \frac{\langle \Psi | - \sum_i \nabla_i^2 / 2m | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle} = - \frac{1}{2m} \frac{\int dx_1 \dots dx_N \Psi^* \nabla_1^2 \Psi}{\int dx_1 \dots dx_N |\Psi|^2} , \quad (1.24)$$

è più complicato, nonostante si tratti di un operatore che agisce sui gradi di libertà di una sola particella, a causa della presenza delle operazioni di derivazione.

Sono stati sviluppati vari metodi per calcolare l'espressione integrale di  $\langle T \rangle$ . In tutti i casi si ottiene un valore di aspettazione dell'energia cinetica che dipende dalla funzione di distribuzione radiale, in modo differente. Se la funzione di distribuzione radiale fosse nota con esattezza, i tre metodi risulterebbero perfettamente equivalenti<sup>3</sup>.

Poiché nel seguito ci concentreremo sul valore di aspettazione del potenziale, non discuteremo le manipolazioni necessarie per il calcolo di  $\langle T \rangle / N$ , ma ci limiteremo ad analizzare l'espansione in cluster del numeratore che compare nella definizione della funzione di distribuzione radiale  $g(r)$ , che determina completamente  $\langle V \rangle / N$ . Utilizzando i risultati della Sezione precedente possiamo scrivere

$$\begin{aligned} F^2 &= \prod_{i<j} f^2(r_{ij}) = f^2(r_{12}) \prod_{ij \neq 12} [1 + h(r_{ij})] \\ &= f^2(r_{12}) [1 + \sum_{i \neq 1,2} X_3(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_i) + \dots] \\ &= f^2(r_{12}) \sum_{n=2}^N X_n(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3, \dots, \mathbf{r}_n) \end{aligned} \quad (1.25)$$

con  $X_2 = 1$  e, ad esempio,

$$X_3(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3) = h(r_{13}) + h(r_{23}) + h(r_{13})h(r_{23}) . \quad (1.26)$$

Sostituendo la (1.25) nella (1.21) si ottiene la

$$\begin{aligned} N(N-1) \sum_{\sigma_1 \sigma_2} \int dx_3 \dots dx_N |\Psi|^2 & \quad (1.27) \\ &= N(N-1) f^2(r_{12}) \sum_{\sigma_1 \sigma_2} \int dx_3 \dots dx_N [1 + (N-2) X_3(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3) + \dots] |\Phi|^2 \\ &= N(N-1) f^2(r_{12}) \sum_{\sigma_1 \sigma_2} \sum_{n=2}^N \int dx_3 \dots dx_N X_n(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3, \dots, \mathbf{r}_n) |\Phi|^2 , \end{aligned}$$

<sup>3</sup>Il confronto dei valori di aspettazione calcolato con i diversi metodi è utilizzato come test delle approssimazioni per la funzione di distribuzione radiale

che, tramite le manipolazioni descritte nell'Appendice A, possiamo finalmente riscrivere nella forma

$$N(N-1) \sum_{\sigma_1 \sigma_2} \int dx_3 \dots dx_N |\Psi|^2 \quad (1.28)$$

$$= f^2(r_{12}) \left[ \Delta_2(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) + \int dx_3 X_3(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3) \Delta_3(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3) + \dots \right],$$

con le funzioni  $\Delta_n(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_n)$  definite nella (A.15).

### 1.3 Rappresentazione diagrammatica

Un cluster di  $n$  particelle si può rappresentare con un diagramma avente  $n$  punti collegati tra loro da linee. L'ordine dei termini dello sviluppo in cluster, e dei corrispondenti diagrammi, è dato dal numero di punti che compaiono in esso. La rappresentazione diagrammatica fornisce uno strumento relativamente semplice per rappresentare gli integrali multidimensionali associati ai termini dell'espansione. Inoltre, l'analisi della struttura topologica dei diagrammi è alla base degli algoritmi che permettono di sommare classi di termini a tutti gli ordini.

Ogni punto rappresenta le coordinate di una particella, eventualmente identificata da un indice  $i$ . Esistono due tipi di punti:

- I punti esterni (punti bianchi) rappresentano le particelle le cui coordinate non vengono integrate. Per esempio le particelle 1 e 2 nel caso dell'espansione del numeratore nell'espressione della  $g(r)$  (Eq. (1.21));
- I punti interni (punti neri) rappresentano le particelle le cui coordinate vengono integrate.

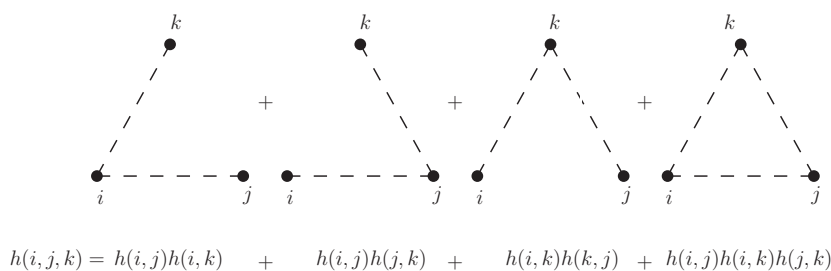
I legami tra le particelle vengono rappresentati da linee e ad ogni tipo connessione tra i punti  $i$  e  $j$  è associata una funzione  $\eta(i, j)$ . Per un sistema di fermioni interagenti le linee di connessione, che rappresentano le correlazioni tra le particelle, sono di due tipi:

- Le correlazioni dinamiche, rappresentate da linee tratteggiate tra i punti  $i$  e  $j$ , corrispondono alla funzione di correlazione  $h(r_{ij})$ ;
- Le correlazioni statistiche, rappresentate da linee continue orientate, corrispondono alla funzione di Slater  $\ell(k_F r_{ij})$

La notazione è quella definita in [6]. Consideriamo, ad esempio, il termine di ordine  $p$  dell'espansione in cluster del fattore di normalizzazione  $\langle \Psi | \Psi \rangle$ . La parte dinamica dell'interazione, contenuta all'interno delle funzioni  $h_p$ , simmetriche per scambio di coordinate, è rappresentata tramite i diagrammi di Yvon-Meyer a  $p$  punti. Questi si ottengono collegando in tutti i modi possibili le coordinate  $x_1 \dots x_p$ , considerando che ogni punto deve essere raggiunto da almeno una linea di correlazione.

Le correlazioni statistiche sono all'interno delle funzioni  $\Delta_p$  espresse a loro volta in termini della funzione di Slater  $\ell$ . I vari termini del determinante sono rappresentati da tutti i possibili modi con cui i punti possono essere collegati con linee orientate,





**Figura 1.1.** I diagrammi Yvon-Meyer a 3 punti.

in modo che ogni punto abbia una linea entrante e una linea uscente e si formino loop chiusi.

Nella Fig.1.2 sono rappresentati i primi contributi dell'espansione (1.17) che corrispondono rispettivamente alle espressioni analitiche

$$\rho^2 \int d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 h(r_{12}) , \tag{1.29a}$$

e

$$\frac{\rho^3}{\nu} \int d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 d\mathbf{r}_3 h(r_{12})h(r_{13})\ell^2(k_F r_{23}) . \tag{1.29b}$$



(a) Rappresentazione diagrammatica della (1.29a).

(b) Rappresentazione diagrammatica della (1.29b).

**Figura 1.2.** Rappresentazione diagrammatica di alcuni contributi alla costante di normalizzazione (1.17).

### 1.3.1 Diagrammi connessi e irriducibili

Si definiscono “labelled” i diagrammi in cui ad ogni punto è associato un indice. Il valore del diagramma “labelled” corrisponde al valore dell’integrale che il diagramma rappresenta: è una funzione delle coordinate dei punti esterni, bianchi, e un funzionale delle funzioni che definiscono le connessioni tra i punti. In particolare non dipende dal modo in cui sono etichettati i punti interni, essendo questi variabili di integrazione. Perciò il corrispondente valore del diagramma “unlabelled” deve contenere un fattore combinatorio determinato dalla topologia del diagramma. Ogni permutazione dei punti interni lascia invariato il valore dell’integrale, tuttavia esiste un sottogruppo

di queste permutazioni che trasforma il diagramma in un altro topologicamente equivalente. L'ordine di questo sottogruppo di permutazioni definisce il fattore di simmetria di cui si deve tener conto nel calcolare il contributo di tutti i diagrammi *topologicamente distinti*.

Una successione di punti e connessioni forma un *cammino* (o *path*). Questi sono *indipendenti* se non hanno punti in comune. Si definisce *connesso* un diagramma i cui punti sono collegati da un cammino continuo, *disconnesso* un diagramma che contiene un insieme di punti disgiunti dagli altri. In un diagramma disconnesso, composto da due o più componenti, i punti appartengono a componenti diverse se non hanno un cammino che li unisce. La rimozione da un diagramma di un punto e tutte le sue connessioni può rendere disconnesso un diagramma connesso. In questo caso il punto è detto di connessione (*connecting*); nel caso in cui la rimozione separi il diagramma in due o più componenti, di cui almeno una disconnessa dai punti esterni, il punto viene chiamato punto di riducibilità e il diagramma di partenza è definito *riducibile*. I diagrammi *irriducibili* non contengono punti di riducibilità.

La classificazione dei diagrammi in connessi e disconnessi mette in luce una proprietà fondamentale dello sviluppo in cluster. In generale un diagramma  $\Gamma$  di ordine  $p$  è costituito da diagrammi connessi diversi, ad esempio da  $n_{A_1}$  copie del diagramma connesso  $\Gamma_{A_1}$ ,  $n_{A_2}$  copie di  $\Gamma_{A_2}$  e così via. Dal momento che le parti disconnesse si fattorizzano, si può scrivere il diagramma totale come prodotto dei singoli diagrammi connessi

$$\Gamma = (\Gamma_{A_1})^{n_{A_1}} (\Gamma_{A_2})^{n_{A_2}} (\Gamma_{A_3})^{n_{A_3}} \dots$$

Considerando in quanti modi si possono distribuire<sup>4</sup> i  $p$  punti tra  $A_1, A_2, \dots$

$$N(A_1, A_2, A_3, \dots) = \frac{p!}{n_{A_1}! (p_{A_1}!)^{n_{A_1}} n_{A_2}! (p_{A_2}!)^{n_{A_2}} n_{A_3}! (p_{A_3}!)^{n_{A_3}}}, \quad (1.30)$$

il contributo di tutti i possibili diagrammi a  $p$  punti diventa

$$\begin{aligned} \sum_p \frac{\Gamma_p}{p!} &= \sum_{A_1, A_2, \dots} \frac{1}{p!} N(A_1, A_2, A_3, \dots) (\Gamma_{A_1})^{n_{A_1}} (\Gamma_{A_2})^{n_{A_2}} (\Gamma_{A_3})^{n_{A_3}} \dots \\ &= \sum_{A_1, A_2, \dots} \frac{1}{n_{A_1}!} \left( \frac{\Gamma_{A_1}}{p_{A_1}!} \right)^{n_{A_1}} \frac{1}{n_{A_2}!} \left( \frac{\Gamma_{A_2}}{p_{A_2}!} \right)^{n_{A_2}} \\ &= \exp \left\{ \sum_{A_i} \frac{\Gamma_{A_i}}{p_{A_i}!} \right\}, \end{aligned} \quad (1.31)$$

dove la somma è limitata ai diagrammi  $A_i$  connessi. Lo sviluppo in cluster, dunque, può essere ricondotto ad una forma esponenziale in cui vengono considerati soltanto i digrammi connessi. Questa è una proprietà del tutto generale, conosciuta sotto il nome di *linked cluster theorem*, che riguarda qualunque sviluppo grafico di una serie perturbativa sia nel problema a molti corpi che in teoria dei campi.

Un'altra cancellazione fondamentale interessa i diagrammi riducibili. Si può dimostrare, infatti, che per un sistema fermionico l'espansione in cluster è anche irriducibile, con cancellazione esatta dei diagrammi riducibili come conseguenza dell'invarianza per traslazioni del sistema [7]. Un semplice esempio di questa cancellazione è illustrato nell' Appendice B.

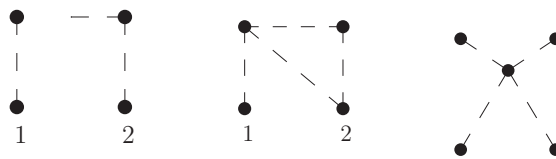
<sup>4</sup>Ci sono  $n_{A_i}$  diagrammi  $A_i$  e una permutazione di questi  $n_{A_i}$  non contribuisce come un diagramma differente; lo stesso vale per una permutazione dei punti interni  $p_{A_i}$

### 1.3.2 Classificazione topologia dei diagrammi irriducibili

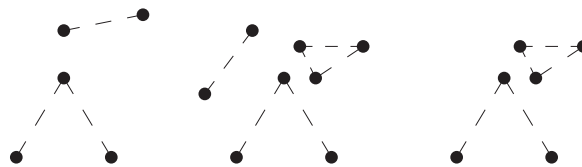
Prima di concludere la trattazione generale dei diagrammi, è necessario introdurre alcune definizioni che riguardano la topologia e che saranno utili in seguito.

Si definisce sottodiagramma  $i - j$  una parte di diagramma collegato al resto soltanto attraverso i punti  $i$  e  $j$ .

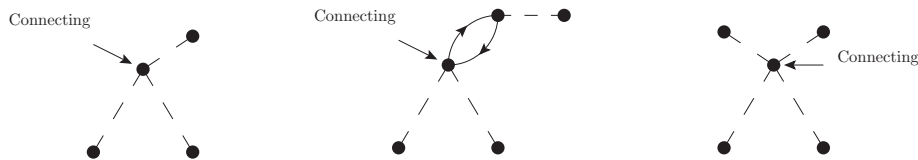
I diagrammi *irriducibili* possono essere classificati come *semplici* o *composti*. I diagrammi composti, o *paralleli*, ammettono più sottodiagrammi indipendenti che collegano i punti esterni 1 e 2, mentre i diagrammi semplici ammettono soltanto un diagramma 1 - 2.



(a) Diagrammi connessi



(b) Diagrammi disconnessi



(c) Diagrammi riducibili

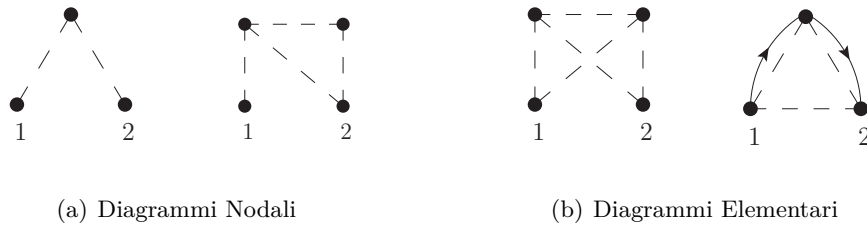
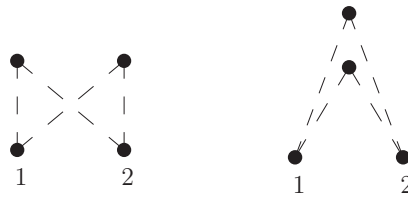
**Figura 1.3.** Diagrammi connessi, disconnessi, riducibili.

I diagrammi semplici si dividono a loro volta in *nodali*, se ammettono un nodo, cioè un punto attraverso il quale passano tutti i cammini che collegano i punti esterni, e *elementari*, se non ammettono nodi.

Questa classificazione sarà utilizzata nel prossimo capitolo per la derivazione delle equazioni chiamate FHNC (Fermi-Hyper-Netted-Chain).

### 1.3.3 Regole per l'espansione diagrammatica della $g(r_{12})$

Alla luce delle considerazioni precedenti, si possono estrarre le seguenti regole per calcolare il contributo dei diagrammi associati ai termini dell'espansione in cluster della funzione di distribuzione radiale  $g(r_{12})$  (Eq.(1.21)).

**Figura 1.4.** Diagrammi semplici.**Figura 1.5.** Diagrammi composti.

- Ad ogni punto interno è associata una funzione  $\gamma$ , che nel caso di sistemi traslazionalmente invarianti consiste in un fattore moltiplicativo  $\rho$ ;
- Ogni punto interno viene raggiunto da almeno una linea di correlazione dinamica e deve essere collegato da almeno un cammino ai punti esterni, poiché il contributo dei diagrammi disconnessi si cancella con il denominatore;
- Le correlazioni statistiche formano loop chiusi e non sovrapponibili. Ad ogni loop contenente  $q$  particelle è associato un fattore  $\nu^{1-q}$  che deriva dall'operazione di traccia sugli spin. Un diagramma a  $L$  loop, con  $q_l$  particelle coinvolte nel loop  $l$ , porta un fattore  $\prod_{l=1}^L (\nu)^{1-q_l} = \nu^{L-Q}$  con  $Q = \sum_l q_l$  e un segno esplicito  $\prod_l (-1)^{q_l-1} = (-1)^{L+Q}$ ;
- Devono essere considerati soltanto i diagrammi irriducibili topologicamente distinti;
- I punti esterni non sono collegati da linee di correlazione dinamica, ma da una linea corrispondente al fattore moltiplicativo  $f^2(r_{12})$ .

Le regole diagrammatiche per il calcolo del valore di aspettazione del potenziale sono analoghe a quelle che abbiamo elencato. L'unica differenza consiste nel fatto che si integra sulle coordinate di tutte le particelle, e i punti 1 e 2 sono connessi da una linea che rappresenta la quantità  $v(r_{12})f^2(r_{12})$ .

## 1.4 Formulazione generale dell'espansione in cluster

Formalmente l'espansione in cluster è stata applicata per la prima volta ai sistemi quantistici di molte particelle correlate da Ywamoto e Yamada [8], e successivamente formulata in modo generale da Feenberg e collaboratori [9, 10].

Un generico operatore hermitiano simmetrico  $S(1 \dots N)$  può essere risolto in somma di operatori a  $n$  particelle, con  $n = 1, \dots, N$ , secondo la

$$S(1 \dots N) = \sum_{n=1}^N S_n(1 \dots n) , \quad (1.32)$$

dove ciascun termine  $S_n(1 \dots n)$  agisce sul sottospazio a  $n$  particelle. Corrispondono a questa descrizione l'operatore hamiltoniana (0.1) e l'operatore

$$P(x_1 \dots x_n; x'_1 \dots x'_n) = \sum_{\langle j_1 \dots j_n \rangle} \sum_{\{\ell_1 \dots \ell_n\}} \prod_{i=1}^n \delta(x_{\ell_i} - x'_{j_i}) , \quad (1.33)$$

il cui valore di aspettazione nello stato fondamentale corrisponde alle funzioni di distribuzione di  $n$  particelle

$$p^{(n)}(x_1 \dots x_n) \equiv \frac{N!}{(N-n)!} \frac{\int dx_{n+1} \dots dx_N |\Psi(x_1 \dots x_N)|^2}{\int dx_1 \dots dx_N |\Psi(x_1 \dots x_N)|^2} . \quad (1.34)$$

Nella (1.33),  $\langle j_1 \dots j_n \rangle$  indica le combinazioni di  $n$  degli  $N$  indici, mentre  $\{\ell_1 \dots \ell_n\}$  si riferisce alle permutazioni.

In analogia con la funzione di partizione in meccanica statistica, si definisce l'integrale di normalizzazione generalizzato [11]

$$I(\beta) = \langle \Psi | e^{\beta S(1 \dots N)} | \Psi \rangle , \quad (1.35)$$

da cui si ricava il valore di aspettazione dell'operatore  $S$  attraverso la ben nota relazione

$$\langle S \rangle = \left. \frac{\partial}{\partial \beta} \ln I(\beta) \right|_{\beta=0} . \quad (1.36)$$

L'espansione in cluster interviene nel calcolo dell'integrale di normalizzazione  $I(\beta)$  e della quantità  $G(\beta) = \ln I(\beta)$ , che svolge il ruolo di funzionale generatore. Il punto di partenza è introdurre funzioni d'onda e operatori che agiscono sui sottospazi di  $n$  particelle con  $n \leq N$ , e definire i rispettivi integrali di (sub-)normalizzazione secondo le stesse convenzioni usate per la funzione d'onda totale e per l'integrale di normalizzazione (1.35).

A partire da una funzione d'onda ristretta ad uno spazio di  $n$  particelle

$$\Psi_{i_1 \dots i_n} = F_n \Phi_{i_1 \dots i_n} , \quad (1.37)$$

su cui agisce la componente  $n$ -esima dell'operatore  $S(1 \dots N)$ , si possono definire i corrispondenti integrali di normalizzazione

$$I_{i_1 \dots i_n} = \langle \Psi_{i_1 \dots i_n} | e^{\beta S(1 \dots n)} | \Psi_{i_1 \dots i_n} \rangle . \quad (1.38)$$

Si noti che la (1.38) è soltanto una delle possibili scelte per gli integrali approssimanti. Unico vincolo all'arbitrarietà delle definizioni è la condizione che per  $n = N$  si abbia  $I_{1 \dots N} \equiv I(\beta)$ .

In assenza di correlazioni tra le particelle, quando cioè tutti gli operatori  $S_n$  con  $n > 1$  sono nulli, i corrispondenti integrali di normalizzazione, indicati con  $\tilde{I}$ , si fattorizzano in componenti a una particella, a meno di termini di ordine  $O(\beta^2)$ <sup>5</sup>

$$\tilde{I}_{i_1 \dots i_n} \rightarrow \prod_k \tilde{I}_{i_k} + O(\beta^2) . \quad (1.39)$$

Questa proprietà consente di scrivere ogni integrale, o qualsiasi combinazione di integrali con lo stesso numero di indici  $n$ , tramite  $\tilde{I}$  e un numero finito di integrali di cluster di dimensione da 1 a  $n$ .

È possibile scomporre le quantità (1.38) in vari modi, ognuno dei quali definisce uno schema di approssimanti differente. Adottando uno schema moltiplicativo<sup>6</sup>, introdotto in [11], si definiscono gli integrali di cluster  $Y_{i_1, \dots, i_n}$  attraverso le relazioni

$$\begin{aligned} I_{i_1}(\beta) &= \tilde{I}_{i_1} Y_{i_1} \\ I_{i_1 i_2}(\beta) &= \tilde{I}_{i_1} \tilde{I}_{i_2} Y_{i_1} Y_{i_2} Y_{i_1 i_2} \\ I_{i_1 i_2 i_3}(\beta) &= \prod_{n=1}^3 \tilde{I}_{i_n} \prod_{m=1}^3 Y_{i_m} \left[ \prod_{1 \leq p < q \leq 3} Y_{i_p i_q} \right] Y_{i_1 i_2 i_3} \\ &\vdots \\ I_{1 \dots N}(\beta) &= \prod_i \tilde{I}_i \prod_i Y_i \left[ \prod_{1 \leq p < q \leq 3} Y_{i_p i_q} \right] \cdots Y_{1 \dots N} , \end{aligned} \quad (1.40)$$

da cui si ottiene una forma particolarmente compatta per il valore di aspettazione di  $S$

$$\langle S \rangle = \sum_{i=1}^N \frac{\partial}{\partial \beta} \ln \tilde{I}_i \Big|_{\beta=0} + \sum_{n=1}^N \sum_{\langle i_1 \dots i_n \rangle} \frac{\partial}{\partial \beta} \ln Y_{i_1 \dots i_n} \Big|_{\beta=0} . \quad (1.41)$$

L'equazione (1.41) è una espansione nel numero delle particelle correlate: il termine  $n$ -esimo dello sviluppo contiene tutti i contributi che coinvolgono  $n$  orbitali del mare di Fermi in modo connesso. Inoltre, ogni termine ha una dipendenza lineare in  $N$  nel limite termodinamico, come richiesto per quantità estensive quali l'energia totale. La proprietà di clustering connesso è strettamente legata alla linearità in  $N$ . L'invarianza per traslazioni garantisce infatti la cancellazione delle potenze di  $N$  diverse da 1 e preserva la connessione dell'espansione.

#### 1.4.1 Il valore di aspettazione dell'energia

Per calcolare il valore di aspettazione dell'energia è comodo seguire le definizioni proposte in [12] per l'integrale di normalizzazione

$$I(\beta) = \langle \Psi | e^{\beta(H-T_F)} | \Psi \rangle , \quad (1.42)$$

<sup>5</sup>Se l'operatore  $S$  è l'hamiltoniana e come funzione modello si usa il determinante di Slater costruito con le autofunzioni dell'hamiltoniana libera  $h_0$  la fattorizzazione è esatta.

<sup>6</sup>A titolo di esempio, nell'Appendice C è illustrato un diverso schema di scomposizione, basato su un algoritmo additivo.

e per gli approssimanti

$$\begin{aligned} I_i(\beta) &= \langle i | e^{\beta(t(1)-\epsilon_i)} | i \rangle = 1 \\ I_{ij}(\beta) &= \langle ij | F^\dagger(12) e^{\beta(t(1)+t(2)+v(12)-\epsilon_i-\epsilon_j)} F(12) | ij \rangle_a . \\ &\vdots \end{aligned} \quad (1.43)$$

Nelle equazioni precedenti,  $T_F$  è l'energia dello stato fondamentale del sistema fermionico non interagente,  $t(i)$  e  $\epsilon_i$  rappresentano l'operatore e l'autovalore dell'energia della singola particella, il ket  $|i_1 \dots i_n\rangle$  indica il prodotto degli stati di singola particella, mentre il ket  $|i_1 \dots i_n\rangle_a$  indica la combinazione antisimmetrica e normalizzata, ovvero il determinante di Slater che definisce le funzioni d'onda dei sottosistemi a  $n$  particelle (1.37). Si ottiene così l'espressione

$$E = T_F + \left. \frac{\partial}{\partial \beta} \ln I(\beta) \right|_{\beta=0} , \quad (1.44)$$

da sviluppare in cluster secondo la (1.41). Il termine  $n$ -esimo dello sviluppo in serie

$$E = T_F + (\Delta E)_2 + (\Delta E)_3 + \dots (\Delta E)_n ,$$

contiene tutti i contributi connessi di  $n$  orbitali del mare di Fermi. La derivazione dei primi termini  $(\Delta E)_n$  è riportata nell'Appendice C.

### 1.4.2 Il funzionale generatore

Stabilito uno schema di approssimazione, dalle (1.40) segue che il funzionale generatore

$$G(\beta) \equiv \ln I(\beta) , \quad (1.45)$$

può essere calcolato come

$$G(\beta) = \sum_{i=1}^N \ln \tilde{I}_i + \sum_{n=1}^N \sum_{\langle i_1 \dots i_n \rangle} \ln Y_{i_1 \dots i_n} . \quad (1.46)$$

L'espansione per il funzionale generatore nel limite termodinamico è riportata in Appendice C. In questo paragrafo si vuole discutere come ricavare il valore di aspettazione sulla funzione d'onda correlata di un generico operatore a due punti  $\Omega = \sum_{ij} \omega_2(r_{ij})$  tramite l'espansione diagrammatica del funzionale generatore

$$G(\beta) = \ln \langle \Psi | e^{\beta \Omega} | \Psi \rangle = \ln \langle \Psi | e^{\beta \sum_{i<j} \omega^{(ij)}} | \Psi \rangle . \quad (1.47)$$

Con  $\beta = 0$ , l'integrale di normalizzazione  $I(0)$  genera la normalizzazione dello stato correlato (1.8). L'espansione diagrammatica

$$G(0) = (\Delta G)_2 + (\Delta G)_3 + \dots$$

sarà, dunque, equivalente all'espansione in diagrammi connessi descritta precedentemente per la costante di normalizzazione  $\langle \Psi | \Psi \rangle$  (1.17). Secondo la notazione stabilita a proposito degli integrali di normalizzazione per l'operatore hamiltoniana

(1.43), le relazioni ricavate nell'appendice C per il funzionale generatore definiscono i termini dello sviluppo di  $G(0)$

$$(\Delta G)_2 = \frac{1}{2} \sum_{ij} \langle ij|h_2(12)|ij\rangle_a \quad (1.48)$$

$$(\Delta G)_3 = \sum_{ijk} \frac{1}{3!} \langle ijk|h_3(123)|ijk\rangle_a - \frac{1}{2} \langle ij|h_2(12)|ij\rangle_a \langle jk|h_2(12)|jk\rangle_a \quad (1.49)$$

$$\dots\dots \quad (1.50)$$

con  $h_2(12)$  e  $h_3(123)$  definite dalla (1.17). Ad esempio,

$$(\Delta G)_2 = \frac{1}{2!} \rho^2 \left[ \int d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 h(r_{12}) - \frac{1}{\nu} \int d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 \ell^2(k_{FR12}) h(r_{12}) \right]. \quad (1.51)$$

In questo modo si generano tutti i contributi ricavati precedentemente con lo sviluppo in cluster della costante di normalizzazione. La rappresentazione diagrammatica dell'espansione del funzionale generatore a  $\beta = 0$  è riportata in Fig. 1.6.

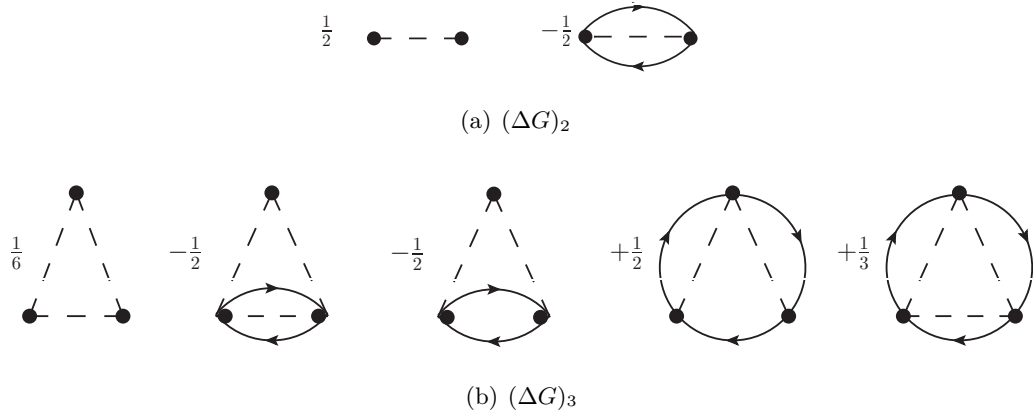


Figura 1.6. I diagrammi per il funzionale generatore  $G(0)$ .

Il vantaggio della formulazione con il funzionale generatore sta nella possibilità di sfruttare la semplicità dell'espansione diagrammatica per calcolare valori di aspettazione di operatori generici  $\Omega$ . Ricordando la definizione di funzione d'onda correlata tramite funzioni di correlazione esponenziali (1.10)  $u(r_{ij}) = \ln f^2(r_{ij})$  si può riscrivere esplicitamente

$$G(\beta) = \ln \langle \Phi | e^{\sum_{i<j} [\beta \omega(r_{ij}) + u(r_{ij})]} | \Phi \rangle, \quad (1.52)$$

e interpretare questa quantità come normalizzazione in una nuova funzione d'onda correlata, dipendente da  $\beta$

$$\tilde{\Psi}(1 \dots N; \beta) = \prod_{i<j} e^{\frac{1}{2} u(r_{ij}; \beta)} \Phi(1 \dots N), \quad (1.53)$$



con funzioni di correlazione esponenziali  $f_{\beta}^2(r_{ij}) \equiv e^{u(r_{ij};\beta)} = e^{[\beta\omega(r_{ij})+u(r_{ij})]}$ . Il funzionale generatore  $G(\beta)$  sarà equivalente al logaritmo della costante di normalizzazione di questo nuovo stato correlato

$$G(\beta) = \tilde{G}(0) = \ln \langle \tilde{\Psi} | \tilde{\Psi} \rangle = \ln \int dx_1 \dots dx_N \left| \tilde{\Psi}(1 \dots N; \beta) \right|^2 . \quad (1.54)$$

Dal punto di vista grafico, questo vuol dire associare alle linee tratteggiate una diversa funzione di correlazione con annesso fattore esponenziale

$$h_{\beta}(r_{ij}) \equiv f^2(r_{ij})e^{\beta\omega(r_{ij})} - 1 , \quad (1.55)$$

e disegnare tutti i diagrammi validi per il funzionale generatore con queste nuove correlazioni dinamiche (la parte prettamente spinoriale non viene modificata).

Per ottenere il valore di aspettazione dell'operatore si deve agire sull'espansione di  $G(\beta)$  con una derivata rispetto a  $\beta$  e calcolare tutto in  $\beta = 0$

$$\langle \Omega \rangle = \left. \frac{\partial}{\partial \beta} G(\beta) \right|_{\beta=0} . \quad (1.56)$$

In termini grafici la derivata porta in basso un fattore  $\omega$  per ogni linea di correlazione  $h_{\beta}$  che compare nel diagramma, trasformano una connessione alla volta in  $\omega(r_{ij})h_{\beta}(r_{ij}) = f^2(r_{ij})\omega(r_{ij})e^{\beta\omega(r_{ij})}$ . Si definisce, quindi, un nuovo tipo di linea, ad esempio una doppia linea, per rappresentare la funzione  $f^2(r)\omega(r)$  e la si sostituisce nei diagrammi per il funzionale generatore a turno ad ogni linea  $h_{\beta}$ . Dovendo calcolare il tutto in  $\beta = 0$ , infatti, in ogni diagramma resta soltanto una doppia linea, mentre tutte le altre funzioni di correlazione ritornano ad assumere il valore  $h(r_{ij})$ .

Con questo metodo si può ricavare l'espansione diagrammatica per l'energia e per le funzioni di distribuzione spaziali. Nel caso dell'energia l'operatore  $\omega$  è il potenziale effettivo a due corpi dell'appendice C.

Infine, dalle funzioni d'onda correlate dipendenti da  $\beta$  (1.53) si definiscono le funzioni di distribuzione generalizzate

$$\tilde{p}^{(n)}(x_1 \dots x_n; \beta) \equiv \frac{N!}{(N-n)!} \frac{\int dx_{n+1} \dots dx_N \left| \tilde{\Psi}(x_1 \dots x_N; \beta) \right|^2}{\int dx_1 \dots dx_N \left| \tilde{\Psi}(x_1 \dots x_N; \beta) \right|^2} , \quad (1.57)$$

riconducibili al valore di aspettazione dell'operatore (1.33). Per  $\beta = 0$  le (1.57) ricostruiscono le matrici densità a  $n$  particelle (1.34). La densità a due corpi generalizzata corrisponde al valore di aspettazione dell'operatore (1.33) sullo stato correlato  $\Psi$  ed è equivalente derivata funzionale di  $G(\beta)$ .

## 1.5 Determinazione della funzione di correlazione

La scelta del fattore di correlazione è un punto cruciale per il successo dell'approccio variazionale. E' indispensabile trovare un buon compromesso tra una forma che sia abbastanza semplice, per non rendere proibitivo il calcolo degli integrali, ma allo stesso tempo rifletta fedelmente le caratteristiche del potenziale di interazione. Questo aspetto è particolarmente importante in sistemi caratterizzati da interazioni che

presentano componenti non sfericamente simmetriche, o che dipendono esplicitamente dai gradi di libertà interni delle particelle costituenti.

Definita la funzione di prova, il principio variazionale garantisce che il valore di aspettazione dell'hamiltoniana

$$E = \frac{\langle \Psi | H | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle}, \quad (1.58)$$

sia un limite superiore per l'energia dello stato fondamentale  $E_0$ , ma non fornisce indicazioni su quanto il valore di  $E$  si discosti da  $E_0$ . Affinché il metodo sia efficiente, è indispensabile scegliere una funzione di prova che sia una buona approssimazione della funzione d'onda esatta.

Se si scrive la funzione d'onda nella forma BDJ, la scelta della funzione variazionale consiste nella scelta della funzione di correlazione  $f(r)$ , che deve annullarsi, o essere molto piccola, nella regione del core repulsivo del potenziale e tendere ad uno per grandi valori della distanza tra le particelle interagenti,  $r$ .

La ricerca del minimo di  $E$  si può effettuare scegliendo un'espressione analitica per la  $f(r)$  dipendente da una serie di parametri che vengono lasciati liberi di variare, oppure derivando un'equazione di Eulero-Lagrange

$$\frac{\delta \langle \Psi | H | \Psi \rangle}{\delta f \langle \Psi | \Psi \rangle} = 0, \quad (1.59)$$

la cui soluzione fornisce direttamente la forma della  $f$  corrispondente al minimo di  $E$ . In entrambi i casi, la difficoltà risiede nel calcolo del valore di aspettazione dell'hamiltoniana.

Avendo ricondotto il valore di aspettazione dell'energia al calcolo della funzione di distribuzione radiale, si può procedere in due modi. Come accennato nell'Introduzione, una possibilità consiste nell'usare il metodo Monte Carlo. Questo approccio, data la funzione di prova, non introduce ulteriori incertezze nel calcolo di  $E$  ed è stato usato con successo per sistemi caratterizzati da interazioni relativamente semplici, come l'elio liquido. Una strada alternativa è l'espansione in cluster degli integrali multidimensionali, che permette di calcolare in modo approssimato il valore di aspettazione dell'hamiltoniana dalla

$$E = E_0 + \sum_{n=2}^{\infty} (\Delta E)_n, \quad (1.60)$$

considerando cluster con un numero crescente di particelle.

Troncare l'espansione ad un ordine finito, però, non preserva il principio variazionale: non è infatti garantito che il valore di aspettazione di  $H$  calcolato con un'espansione troncata sia ancora un limite superiore dell'energia dello stato fondamentale. La validità del principio variazionale non viene inficiata se nella serie troncata sono contenuti tutti i termini significativi. Ad esempio, se ci si limita ad includere il contributo dei cluster di due particelle, questa condizione è verificata se  $(\Delta E)_n \sim 0$  per  $n \geq 3$ . Per ottenere una rapida convergenza della (1.60) si possono porre dei vincoli sulla forma della  $f$ , limitandone il range o richiedendo che non possa assumere valori maggiori di uno. In generale però il valore di  $E$  che si ottiene da questa procedura, pur essendo un limite superiore dell'energia, può essere molto diverso dall'autovalore  $E_0$ .

Un metodo che permette di migliorare la stima di  $E_0$  nell'ambito del formalismo delle funzioni d'onda correlate è fondato sull'idea che il risultato variazionale si può considerare l'ordine zero di una serie perturbativa, i cui termini successivi permettono di effettuare un calcolo sistematico della differenza  $E - E_0$ . Questo approccio è alla base della teoria delle perturbazioni nella base delle funzioni correlate (CBF, o Correlated Basis Function perturbation theory), che verrà illustrata brevemente nella Sezione seguente.

### 1.5.1 Teoria delle perturbazioni nella base correlata

Nella teoria delle perturbazioni nella base correlata tutti gli autostati dell'hamiltoniana del gas di Fermi,  $\Phi_n$ , vengono modificati dall'applicazione dell'operatore di correlazione  $F$ . Si ottiene così una nuova base di stati

$$|\Psi_m\rangle \equiv \frac{F|\Phi_m\rangle}{\langle\Phi_m|F^\dagger F|\Phi_m\rangle}, \quad (1.61)$$

che formano un insieme completo, ma non ortogonale.

Una volta definita la base correlata, l'hamiltoniana del sistema si può esprimere come somma di due secondo la

$$H = H_0 + H_I, \quad (1.62)$$

dove  $H_0$  e  $H_I$  sono la parte diagonale e non diagonale di  $H$  nella base correlata, cioè

$$\begin{aligned} \langle\Psi_m|H_0|\Psi_n\rangle &= \delta_{mn} \langle\Psi_m|H|\Psi_n\rangle \\ \langle\Psi_m|H_I|\Psi_n\rangle &= (1 - \delta_{mn}) \langle\Psi_m|H|\Psi_n\rangle. \end{aligned} \quad (1.63)$$

Se le funzioni di correlazione  $f$  che compaiono nella definizione di  $F$  sono state scelte in modo appropriato, cioè se il valore di aspettazione dell'hamiltoniana nello stato fondamentale correlato,  $E$  dell'Eq. (1.7), è prossimo all'autovalore  $E_0$ , gli stati correlati hanno grande overlap con gli autostati di  $H$  e gli elementi di matrice di  $H_I$  sono piccoli. Di conseguenza, l'espansione perturbativa in potenze di  $H_I$  converge rapidamente.

La difficoltà principale che si incontra nell'implementare lo schema proposto risiede nella non ortogonalità degli stati correlati, che implica

$$N_{nm} = \langle\Psi_n|\Psi_m\rangle \neq 0. \quad (1.64)$$

Utilizzare una base non ortogonale, pur essendo possibile, introduce un livello di complicazione notevole. Per risolvere questo problema, in [13] è stata sviluppata una procedura che permette di ortogonalizzare gli stati correlati conservando gli elementi di matrice di  $H_0$ , cioè gli elementi di matrice diagonali di  $H$ .

Denotando con  $|\tilde{\Psi}_n\rangle$  lo stato che si ottiene dall'ortogonalizzazione di  $|\Psi_n\rangle$ , in questo schema possiamo ottenere le correzioni alla stima variazionale dell'energia dello stato fondamentale,  $E$ , che rappresenta l'ordine zero dello sviluppo in serie di potenze di  $H_I$ . Possiamo cioè scrivere

$$\Delta E_0 = E - E_0 = \sum_{n=2}^{\infty} \Delta E_0^{(n)}, \quad (1.65)$$

dove, ad esempio

$$\Delta E_0^{(2)} = \sum_{n \neq 0} \frac{|\langle \tilde{\Psi}_n | H_I | \tilde{\Psi}_0 \rangle|^2}{E - \langle \tilde{\Psi}_n | H_0 | \tilde{\Psi}_n \rangle}, \quad (1.66)$$

Gli elementi di matrice di  $H$  possono essere calcolati effettuando una espansione in cluster, generalizzando il metodo presentato nella Sezione 1.2 per gli elementi diagonali.

La teoria delle perturbazioni nella base correlata permette anche di ottenere le correzioni agli stati della base correlata, ed è stata usata con successo per calcolare diverse proprietà della materia nucleare, come l'equazione di stato a temperatura nulla [14], la funzione di risposta lineare [15] e la funzione di Green [16].

## 1.6 Equazioni integrali per il calcolo della $g(r_{12})$

L'espansione della funzione di distribuzione radiale in una serie infinita di termini risulterebbe poco utile se non fosse accompagnata da una prescrizione su come sommare i diversi diagrammi. In questa Sezione descriviamo l'algoritmo utilizzato per derivare equazioni integrali la cui soluzione permette di sommare termini dell'espansione in cluster, classificati secondo la topologia dei diagrammi ad essi associati, a tutti gli ordini. Per rendere la discussione più semplice, prenderemo prima in considerazione un sistema bosonico, in cui si deve tenere conto soltanto delle linee di correlazione dinamiche, tralasciando le difficoltà che derivano dalle linee di scambio tipiche di un sistema fermionico. L'espansione per la funzione di distribuzione radiale bosonica si ottiene dal caso fermionico nel limite di degenerazione  $\nu \rightarrow \infty$  a densità  $\rho$  costante. In questo limite, infatti,  $k_F \rightarrow 0$  e la funzione di Slater  $\ell \rightarrow 1$ .

### 1.6.1 Equazioni HNC (Hyper-Netted Chain)

La funzione di distribuzione radiale, calcolata sommando tutti i diagrammi connessi irriducibili, si può scrivere nella forma

$$g(r_{12}) = f^2(r_{12}) \left[ 1 + \sum_{n=1} \rho^n g_{(n)}(r_{12}) \right]. \quad (1.67)$$

dove con  $g_{(n)}$  vengono indicati i contributi di ordine  $n$ , cioè con  $n$  punti interni. Seguendo la classificazione topologica discussa nella Sezione 1.3, si indicano tutti i diagrammi nodali con  $N(r_{12})$ , tutti i diagrammi elementari con  $E(r_{12})$  e i diagrammi composti con  $C(r_{12})$ . Il contributo dei diagrammi connessi si può scrivere in modo compatto tramite una forma esponenziale di diagrammi semplici (elementari e nodali)

$$g(r_{12}) = f^2(r_{12}) e^{[N(r_{12}) + E(r_{12})]}. \quad (1.68)$$

Infatti i diagrammi composti non sono altro che diagrammi semplici connessi in parallelo tra i punti esterni e si possono ottenere dai termini non lineari dello sviluppo in serie dell'esponenziale

$$g(r_{12}) = f^2(r_{12}) \left\{ 1 + N(r_{12}) + E(r_{12}) + \frac{1}{2!} [N(r_{12}) + E(r_{12})]^2 + \dots \right\} \quad (1.69)$$

La (1.69) può essere riscritta mettendo in evidenza il contributo dei diversi tipi di diagrammi

$$g(r_{12}) = 1 + N(r_{12}) + E(r_{12}) + X(r_{12}) \quad (1.70)$$

dove con  $X(r_{12})$  si indicano tutti i diagrammi non nodali, cioè tutti i diagrammi composti  $C(r_{12})$ , moltiplicati per il fattore di correlazione  $f^2(r_{12})$  e il termine  $[1 + N(r_{12}) + E(r_{12})]$  moltiplicato per  $h(r_{12})$  contenuto in  $f^2(r_{12})$ .

L'approssimazione *Hyper-Netted Chain* (HNC) consiste nel trascurare i diagrammi elementari. In questo schema, la funzione  $X(r_{12})$  contiene tutti i diagrammi nodali collegati in parallelo, mentre i diagrammi nodali  $N(r_{12})$  possono essere costruiti connettendo in serie diagrammi non nodali, da cui il nome *chain expansion*. Le equazioni (1.68) e (1.70) si riducono quindi a

$$g(r_{12}) = f^2(r_{12}) e^{N(r_{12})}, \quad (1.71a)$$

$$g(r_{12}) = 1 + N(r_{12}) + X(r_{12}). \quad (1.71b)$$

Trascurare i diagrammi elementari permette di scrivere  $N(r_{12})$  in modo compatto per mezzo di un'equazione integrale data dalla convoluzione di diagrammi nodali e non nodali

$$N(r_{12}) = \rho \int d\mathbf{r}_3 X(r_{13}) [N(r_{32}) + X(r_{32})]. \quad (1.71c)$$

Le (1.71) sono le equazioni HNC per un sistema bosonico.

Esprimendo  $N(r_{12})$  in termini di  $g(r_{12})$  e  $f^2(r_{12})$

$$N(r_{12}) = \ln g(r_{12}) - \ln f^2(r_{12}), \quad (1.72)$$

il contributo dei diagrammi non nodali prende la forma

$$X(r_{12}) = g(r_{12}) - N(r_{12}) - 1 = g(r_{12}) - \ln g(r_{12}) + \ln f^2(r_{12}) - 1, \quad (1.73)$$

e l'equazione integrale (1.71c) diventa

$$\begin{aligned} \ln g(r_{12}) - \ln f^2(r_{12}) &= \\ &= \rho \int d\mathbf{r}_3 [g(r_{13}) - \ln g(r_{13}) + \ln f^2(r_{13}) - 1] [g(r_{32}) - 1]. \end{aligned} \quad (1.74)$$

Questa formulazione è particolarmente utile nel calcolo numerico della funzione di distribuzione radiale dal momento che, in presenza di una convoluzione, l'equazione integrale nello spazio delle trasformate di Fourier si riduce ad una equazione algebrica. Per qualsiasi scelta del fattore di correlazione  $f(r)$ , la soluzione per la funzione di distribuzione radiale può essere trovata iterativamente:

1. In prima approssimazione  $N^{(0)} = 0$  e  $X^{(0)} = f^2(r_{12}) - 1$  ;
2. Si ricava quindi il primo ordine per  $N$  tramite la convoluzione (1.71c)

$$N^{(1)}(k) = \frac{\rho [X^{(0)}(k)]^2}{1 - \rho X^{(0)}(k)} ;$$

3. L'ordine successivo per  $X$  si ricava usando  $N^{(1)}$

$$X^{(1)}(r_{12}) = f^2(r_{12}) e^{N^{(1)}(r_{12})} - N^{(1)}(r_{12}) - 1 ;$$

4. Si procede ripartendo dal punto 2 ;

Il procedimento si arresta quando il valore assoluto della differenza tra le funzioni di distribuzione ottenute in due iterazioni successive diviene minore di una quantità assegnata.

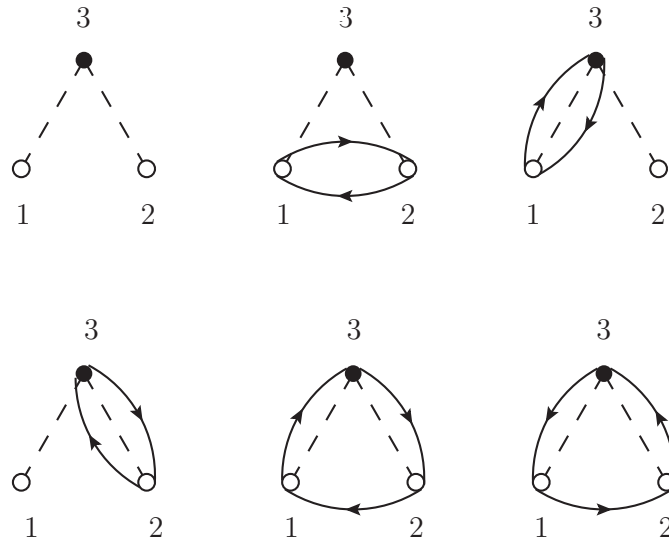
### 1.6.2 Equazioni FHNC (Fermi Hyper-Netted Chain)

L'estensione del metodo HNC al caso fermionico deve tener conto della coesistenza di linee di correlazione statistiche e dinamiche all'interno dello stesso diagramma. Ad esempio, il contributo lineare in  $\rho$  alla funzione di distribuzione radiale, oltre al prodotto di correlazioni dinamiche (Fig. 1.1) deve contenere anche la funzione  $g_{FG}^{(3)}(r_1, r_2, r_3)$  (Eq.(A.17)). Ne consegue che al primo ordine in densità i diagrammi possibili sono 6 (Fig.1.7) e non uno come nel caso bosonico.

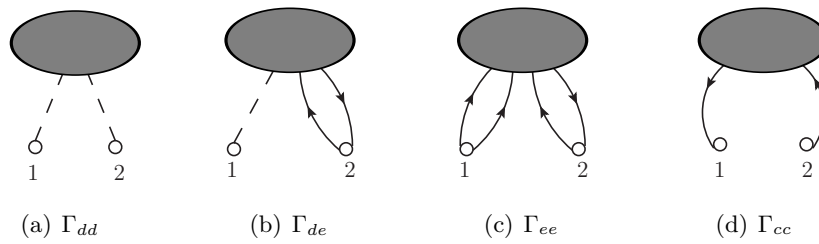
In generale i diagrammi, nodali e non, con cui costruire la  $g(r)$  in approssimazione FHNC necessitano di una classificazione ulteriore. Dalla Fig.1.8 si possono individuare 4 classi topologiche

- I diagrammi in cui i punti esterni non sono raggiunti da linee statistiche,  $\Gamma_{dd}(r_{12})$  (Fig.1.8(a));
- I diagrammi in cui solo uno dei punti esterni è coinvolto in un loop di linee statistiche che lo collegano a punti interni,  $\Gamma_{de}(r_{12})$  o  $\Gamma_{ed}(r_{12})$  (Fig.1.8(b));
- I diagrammi in cui entrambi i punti esterni sono inseriti all'interno di due loop indipendenti di linee statistiche che li collegano a punti interni differenti,  $\Gamma_{ee}(r_{12})$  (Fig.1.8(c));
- I diagrammi in cui i punti esterni sono collegati ai punti interni da un cammino di linee di scambio che inizia in  $r_1$  e termina in  $r_2$ ,  $\Gamma_{cc}(r_{12})$  indicati con il nome di *cyclic chain* (Fig.1.8(d)).

Collegare in serie questi diagrammi per creare diagrammi nodali richiede qualche attenzione in più rispetto al caso bosonico. Il risultato finale è che per ottenere la funzione di distribuzione radiale è necessario risolvere un sistema di quattro equazioni integrali accoppiate. Per la discussione di questo problema si rimanda all'Appendice D.



**Figura 1.7.** I diagrammi del primo ordine per la funzione di distribuzione radiale di un sistema fermionico.



**Figura 1.8.** Classificazione dei diagrammi nel caso fermionico.

L'approccio variazionale basato sull'uso di una funzioni d'onda correlata, insieme alla sua versione più estesa CBF, non è l'unica strada percorribile per trattare il problema a molti corpi di un sistema di fermioni interagenti. Per un lungo periodo è stato utilizzato l'approccio perturbativo, nella versione formulata da Brueckner e collaboratori [17, 18, 19] e poi ampliata nell'espansione Bethe, Brueckner e Goldstone [4].

Nonostante il potenziale di interazione a due particelle di un sistema a molti corpi possa essere tutt'altro che debole, a densità ragionevolmente basse l'espansione perturbativa può risultare efficace se si considerano i termini che a tutti gli ordini hanno una dipendenza lineare dalla densità e dal numero di particelle e si trascurano potenze superiori della densità.

## 2.1 La teoria delle perturbazioni indipendenti dal tempo

Si consideri un generico problema perturbativo indipendente dal tempo

$$H = H_0 + H_1 \quad (2.1)$$

in cui  $H_1$  è una perturbazione all'hamiltoniana  $H_0$  di cui si conoscono autovettori e autovalori

$$(H_0 - E_i) |\xi_i\rangle = 0 \quad , \quad i = 0, 1, \dots .$$

L'energia  $E$  dello stato fondamentale  $|\psi\rangle$  dell'hamiltoniana totale  $H$  può essere ottenuta proiettando su  $\langle \xi_0 |$  l'equazione agli autovalori  $(H_0 + H_1 - E) |\psi\rangle = 0$ , ottenendo

$$E - E_0 = \langle \xi_0 | H_1 | \psi \rangle . \quad (2.2)$$

L'equazione (2.2), in cui è stata usata la condizione di normalizzazione  $\langle \xi_0 | \psi \rangle = 1$ , definisce lo shift in energia dovuto alla perturbazione in modo implicito, dal momento che dipende dall'autostato  $|\psi\rangle$  incognito. Scopo della teoria delle perturbazioni è determinare uno sviluppo in serie per  $E$  che dipenda da quantità note, solitamente



grandezze riconducibili al sistema imperturbato, riscrivendo opportunamente il vettore di stato  $|\psi\rangle$ .

Si introduce l'operatore di proiezione sullo stato fondamentale imperturbato  $P = |\xi_0\rangle\langle\xi_0|$  insieme al proiettore sul sottospazio ortogonale  $Q = 1 - P$  (operatore di Pauli), tramite il quale lo stato  $|\psi\rangle$  si può scrivere

$$|\psi\rangle = P|\psi\rangle + (1 - P)|\psi\rangle = |\xi_0\rangle + Q|\psi\rangle . \quad (2.3)$$

L'equazione agli autovalori, riscritta in funzione di una costante generica  $\varepsilon$  nella forma

$$(\varepsilon - H_0)|\psi\rangle = (\varepsilon - E + H_1)|\psi\rangle , \quad (2.4)$$

permette di esplicitare

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\varepsilon - H_0} (\varepsilon - E + H_1)|\psi\rangle , \quad (2.5)$$

da cui, sostituendo iterativamente a secondo membro l'espressione (2.3), si ottiene la serie perturbativa per lo stato fondamentale

$$|\psi\rangle = \sum_{n=0} \left[ Q \frac{1}{\varepsilon - H_0} (\varepsilon - E + H_1) \right]^n |\xi_0\rangle , \quad (2.6)$$

e per lo shift in energia

$$E - E_0 = \sum_{n=0} \langle\xi_0|H_1 \left[ Q \frac{1}{\varepsilon - H_0} (\varepsilon - E + H_1) \right]^n |\xi_0\rangle . \quad (2.7)$$

Diverse scelte della costante  $\varepsilon$  determinano espansioni perturbative differenti. La teoria delle perturbazioni di Brillouin-Wigner (BW) usa  $\varepsilon = E$ , col risultato

$$\begin{aligned} |\psi\rangle &= \sum_{n=0} \left[ Q \frac{1}{E - H_0} (H_1) \right]^n |\xi_0\rangle , \\ E - E_0 &= \sum_{n=0} \langle\xi_0|H_1 \left[ Q \frac{1}{E - H_0} (H_1) \right]^n |\xi_0\rangle , \end{aligned} \quad (2.8a)$$

mentre con  $\varepsilon = E_0$ , secondo la prescrizione di Rayleighh- Schödinger (RS), si ottiene

$$\begin{aligned} |\psi\rangle &= \sum_{n=0} \left[ Q \frac{1}{E_0 - H_0} (E_0 - E + H_1) \right]^n |\xi_0\rangle , \\ E - E_0 &= \sum_{n=0} \langle\xi_0|H_1 \left[ Q \frac{1}{E_0 - H_0} (E_0 - E + H_1) \right]^n |\xi_0\rangle . \end{aligned} \quad (2.8b)$$

Nessuna delle due formulazioni riesce, però, a descrivere adeguatamente il problema a molti corpi. Dallo sviluppo perturbativo della funzione d'onda e dello shift di energia ci si aspetta di ottenere quantità convergenti nel limite termodinamico e, nel caso dell'energia, una dipendenza lineare dal numero di particelle.

La teoria delle perturbazioni BW ottiene una prima correzione all'energia  $\langle\xi_0|H_1|\xi_0\rangle \sim N\rho$  e infiniti termini successivi indipendenti da  $N$ . Seppure ognuno di questi sia individualmente trascurabile rispetto alla correzione al primo ordine, la presenza di infiniti termini finiti non può garantire la convergenza della serie.

Nella serie di RS, invece, i primi termini sono tutti  $\sim N\rho$  e dall'ordine quattro in poi compaiono anche contributi  $\sim N^2, N^3 \dots$ . Si potrebbe pensare di trascurare questi termini dal momento che rappresentano contributi non fisici e ottenere in questo modo uno sviluppo convergente per l'energia. La cancellazione di questi contributi non fisici è stata dimostrata per il primi termini dello sviluppo da Brueckner [20]. Tuttavia la teoria delle perturbazioni RS per la funzione d'onda risulta ugualmente inadeguata, dal momento che la descrizione dello stato del sistema attraverso un numero finito di eccitazioni di coppie di particelle dallo stato fondamentale della teoria libera non può essere esatta per un numero di particelle sufficientemente grande.

## 2.2 Il teorema di Goldstone

La teoria di Goldstone rappresenta una soluzione formale al problema di molti corpi fermionici in interazione [4]. Grazie alle tecniche sviluppate in teoria dei campi, in particolare i diagrammi di Feynman, permette di calcolare lo shift in energia dello stato fondamentale, insieme alla stessa funzione d'onda e, soprattutto, riformula la teoria delle perturbazioni indipendenti dal tempo in modo da risolvere definitivamente il problema dei diagrammi disconnessi. Il risultato finale è una espansione in diagrammi proporzionali al volume del sistema,  $\Omega$ , moltiplicato per potenze della densità  $\rho$  il cui grado è determinato dal numero di linee associate a particelle che occupano stati del mare di Fermi (*hole lines*).

### 2.2.1 Diagrammi connessi

Pur riguardando un problema indipendente dal tempo, la trattazione di Goldstone ricorre alla teoria delle perturbazioni dipendenti dal tempo e definisce una hamiltoniana perturbata

$$H(t) = H_0 + e^{-\epsilon|t|} H_1 , \quad (2.9)$$

che coincide con la vera hamiltoniana  $H$  al tempo  $t = 0$ . Per tempi  $t \rightarrow \pm\infty$  la perturbazione si annulla e lo stato fondamentale coincide lo stato fondamentale della teoria libera. Il limite  $\epsilon \rightarrow 0$  descrive l'accensione adiabatica dell'interazione, processo che impedisce al sistema salti energetici finiti in un tempo indefinitamente lungo.

Nella rappresentazione di interazione la perturbazione adiabatica ha una dipendenza temporale

$$H_1(t) = e^{-\epsilon|t|} e^{iH_0 t} H_1 e^{-iH_0 t} , \quad (2.10)$$

tramite la quale l'operatore di evoluzione temporale per gli stati

$$|\Psi_I(t)\rangle = \hat{U}_\epsilon(t, t_0) |\Psi_I(t_0)\rangle , \quad (2.11)$$

si può scrivere nella forma<sup>1</sup>

$$\begin{aligned} \hat{U}_\epsilon(t, t_0) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-i)^n}{n!} \int_{t_0}^t dt_1 \dots \int_{t_0}^t dt_n \\ \times e^{-\epsilon(|t_1| + \dots + |t_n|)} \mathcal{T} \left[ \hat{H}_1(t_1) \dots \hat{H}_1(t_n) \right] . \end{aligned} \quad (2.12)$$

<sup>1</sup> In questo capitolo e nei successivi si adotterà la convezione  $\hbar=1$

Per valori di  $\epsilon$  finiti, l'autostato della teoria in presenza di interazione è legato all'autostato della teoria libera tramite la relazione

$$|\Psi\rangle_H = |\Psi_I(0)\rangle = \hat{U}_\epsilon(0, -\infty) |\Phi\rangle, \quad (2.13)$$

la quale, però, perde significato nel limite  $\epsilon \rightarrow 0$  dal momento che  $|\Psi\rangle$  assume una fase divergente come  $\epsilon^{-1}$ .

Il punto di partenza della soluzione proposta da Goldstone è il teorema di Gell-Mann e Low, un teorema generale della teoria dei campi valido per qualsiasi sistema che abbia uno stato fondamentale non degenerare. Il teorema garantisce che, se esiste a tutti gli ordini della teoria delle perturbazioni, lo stato

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{\hat{U}_\epsilon(0, -\infty) |\Phi\rangle}{\langle \Phi | \hat{U}_\epsilon(0, -\infty) | \Phi \rangle} \equiv \frac{|\Psi\rangle}{\langle \Phi | \Psi \rangle}, \quad (2.14)$$

è un autostato dell'hamiltoniana totale  $H$

$$H \frac{|\Psi\rangle}{\langle \Phi | \Psi \rangle} = E \frac{|\Psi\rangle}{\langle \Phi | \Psi \rangle}. \quad (2.15)$$

Il teorema, dunque, genera lo stato fondamentale della teoria di interazione  $\Psi$  a partire dallo stato fondamentale della teoria libera  $\Phi$  con accensione adiabatica dell'interazione e garantisce che un sistema che si trova ad un dato istante  $t_0$  in un autostato di  $H(t_0)$ , rimarrà agli istanti successivi autostato di  $H(t)$ . Per la dimostrazione del teorema È fondamentale che con ci sia degenerazione dello stato fondamentale, altrimenti non detto che lo stato evoluto secondo la (2.12) sia il reale *ground state* del sistema.

Scopo del termine a denominatore nell'equazione (2.14) è garantire la cancellazione della fase infinita per  $\epsilon \rightarrow 0$  a tempi  $t \rightarrow \infty$ . Moltiplicando per il bra  $\langle \Phi |$ , l'equazione (2.15) si traduce in una formula per lo shift in energia

$$E - E_0 = \frac{\langle \Phi | H_1 | \Psi \rangle}{\langle \Phi | \Psi \rangle}. \quad (2.16)$$

La formula di Goldstone, parte dal risultato di Gell-Mann e Low, esplicita l'operatore di evoluzione temporale  $\hat{U}_\epsilon(0, -\infty)$  secondo la formula (2.12) con estremi di integrazione  $t_0 = -\infty$  e  $t = 0$ , inglobando l'operatore indipendente dal tempo  $H_1$  nel  $\mathcal{T}$ -prodotto come  $H_1(0)$ . Il numeratore della (2.16) diventa

$$\begin{aligned} \langle \Phi | H_1 \hat{U}_\epsilon(0, -\infty) | \Phi \rangle &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-i)^n}{n!} \int_{-\infty}^0 dt_1 \dots dt_n e^{\epsilon(t_1 + \dots + t_n)} \\ &\quad \times \langle \Phi | \mathcal{T} [\hat{H}_1(0) \hat{H}_1(t_1) \dots \hat{H}_1(t_n)] | \Phi \rangle. \end{aligned} \quad (2.17)$$

L'analisi di questa espressione è semplice in termini grafici. Il termine  $H_1(0)$ , fisso in ogni possibile ordinamento temporale avendo un tempo superiore a tutti gli altri, consente di distinguere in connessi e disconnessi i diagrammi che si ottengono dalla (2.17) tramite il teorema di Wick (che sarà discusso più avanti): risulteranno connessi i diagrammi contratti su  $H_1(0)$ , disconnessi gli altri. Supponendo che siano  $k$  i diagrammi connessi e  $m$  i disconnessi, con  $n = k + m$  e avendo  $n!/k!m!$  modi di

distribuire le variabili temporali tra le due categorie di diagrammi, la sommatoria della (2.17), si può separare di due sommatorie indipendenti

$$\begin{aligned} \sum_{k=0}^{\infty} \sum_{m=0}^{\infty} (-i)^{k+m} \frac{1}{k!m!} \int_{-\infty}^0 dt_1 \dots dt_k \langle \Phi | \mathcal{T} [\hat{H}_1(0) \hat{H}_1(t_1) \dots \hat{H}_1(t_k)] | \Phi \rangle_{\text{connessi}} \\ \times \int_{-\infty}^0 dt_{k+1} \dots dt_{k+m} \langle \Phi | \mathcal{T} [\hat{H}_1(t_{k+1}) \dots \hat{H}_1(t_{k+m})] | \Phi \rangle . \end{aligned} \quad (2.18)$$

Nella (2.18) sono stati momentaneamente tralasciati gli esponenziali in  $\epsilon$ . Quello che si ottiene è una fattorizzazione completa dei diagrammi disconnessi, il cui contributo è identico al termine a denominatore, con cui si semplifica. Avendo eliminato i termini divergenti, è possibile passare al limite  $\epsilon \rightarrow 0$  con un risultato finale per l'energia dello stato fondamentale che dipende esclusivamente dai diagrammi connessi.

### 2.2.2 Le contrazioni di Wick

Per un sistema di  $N$  particelle la scomposizione dell'hamiltoniana nella forma  $H = H_0 + H_1$  prevede l'introduzione di un opportuno potenziale di singola particella  $V$ , che fornisca una descrizione in termini di particelle indipendenti tramite l'hamiltoniana

$$H_0 = \sum_i T_i + V_i , \quad (2.19)$$

e renda trascurabili i termini di ordine superiore nell'espansione in

$$H_1 = \sum_{i < j} v(ij) - \sum_i V(i) . \quad (2.20)$$

Ricorrendo al formalismo della seconda quantizzazione, si definiscono gli  $a_n^\dagger$  e  $a_n$ , operatori di creazione e distruzione degli stati di singola particella  $\psi_n$ , autostati dell'hamiltoniana  $H_0$  con autovalori  $E_n$ . L'hamiltoniana si presenta quindi come

$$\begin{aligned} H_0 &= \sum_n E_n a_n^\dagger a_n \\ H_1 &= \sum_{rsmn} \langle rs|v|mn \rangle a_r^\dagger a_s^\dagger a_n a_m - \sum_{pq} \langle p|V|q \rangle a_p^\dagger a_q , \end{aligned} \quad (2.21a)$$

con

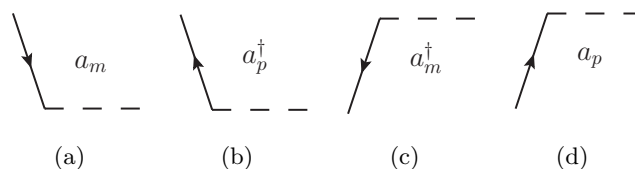
$$\begin{aligned} \langle rs|v|mn \rangle &\equiv \int dx_1 dx_2 \psi_s^*(1) \psi_r^*(2) v(12) \psi_m(1) \psi_n(2) , \\ \langle p|V|q \rangle &\equiv \int dx_1 \psi_p^*(1) V(1) \psi_q(1) . \end{aligned} \quad (2.21b)$$

L'elemento di matrice  $\langle rs|v|mn \rangle$ , su cui non è stata seguita nessuna operazione di antisimmetrizzazione, rappresenta una interazione in cui una particella passa dallo stato  $\psi_m$  allo stato  $\psi_r$ , mentre un'altra particella transisce da  $\psi_n$  a  $\psi_s$ . Risulta, quindi, equivalente all'elemento di matrice  $\langle sr|v|nm \rangle$  ma non a  $\langle rs|v|nm \rangle$ , a causa delle leggi di anticommutazione a cui gli operatori fermionici sono soggetti. La sommatoria su tutti i possibili stati della (2.21) è da intendersi soltanto sugli

elementi di matrice differenti, oppure su tutti gli elementi di matrice introducendo un fattore  $1/2$ . Questo modo di considerare le proprietà di antisimmetria è mirato allo rappresentazione grafica delle interazioni.

Agli operatori  $a_n$  e  $a_n^\dagger$  si può attribuire una interpretazione differente, in base allo stato  $\psi_n$  che rappresentano. Indicando con  $\Phi$  lo stato fondamentale di  $H_0$ , determinante di Slater dei primi  $N$  livelli di singola particella e supposto non degeneri, gli stati occupati in  $\Phi$  sono indicati come stati non eccitati ( $k < k_F$ ), mentre i livelli più alti rappresentano i livelli eccitati ( $k > k_F$ ). Gli stati al di sotto della superficie di Fermi non occupati sono interpretabili come lacune (*holes*), gli stati eccitati occupati come particelle e lo stato  $\Phi$  come stato di vuoto. In termini di particelle e lacune, il ruolo degli operatori  $a_n$  e  $a_n^\dagger$  per gli stati non eccitati è da considerarsi invertito, con  $a_n$  operatore di creazione di una lacuna e  $a_n^\dagger$  operatore di distruzione di una lacuna nello stato  $\psi_n$ .

La rappresentazione grafica dei vari operatori fermionici è riportata in Fig. 2.1 con l'asse temporale orientato per convenzione dal basso verso l'alto. Le linee di particella sono rappresentate da frecce che puntano nella stessa direzione dell'asse temporale, le linee di lacuna nella direzione opposta.



**Figura 2.1.** Rappresentazione grafica degli operatori di creazione e distruzione degli stati di particella e di lacuna.

I vari termini dell'espansione nella formula (2.18) sono prodotti tempo-ordinati di operatori  $H_I(t)$ , combinazioni di due o quattro operatori di creazione e distruzione al tempo  $t$ . Grazie al teorema di Wick, il T-prodotto di questi operatori può essere scritto come somma del loro prodotto normale, più la somma di tutti i prodotti normali con un numero via via crescente di contrazioni di coppie di operatori. Ogni termine della somma va moltiplicato per il fattore  $(-1)^p$  dove  $p$  indica la parità della permutazione richiesta per mettere in successione gli operatori contratti. Poiché il valore di aspettazione sullo stato di vuoto di un prodotto normale si annulla, il valore di aspettazione del T-prodotto si riduce alla somma del prodotto di contrazioni di coppie di operatori, con il segno determinato dalla parità della permutazione.

Dalla definizione di operatori di creazione e distruzione segue

$$\overline{a_q(t_1)a_{q'}^\dagger(t_2)} = \begin{cases} \delta_{q,q'}e^{-iE_q(t_1-t_2)} & \text{se } t_1 > t_2 \text{ e } q, q' > k_F \\ -\delta_{q,q'}e^{-iE_q(t_1-t_2)} & \text{se } t_1 > t_2 \text{ e } q, q' < k_F \end{cases}, \quad (2.22a)$$

e

$$\overline{a_{q'}^\dagger(t_2)a_q(t_1)} = -\overline{a_q(t_1)a_{q'}^\dagger(t_2)} \quad (2.22b)$$

mentre le altre contrazioni  $\overline{aa}$  e  $\overline{a^\dagger a^\dagger}$  si annullano. Alla luce della relazione

$$\overline{a_q(t_1)a_{q'}^\dagger(t_2)} = \langle \Phi | T \{ a_q(t_1)a_{q'}^\dagger(t_2) \} | \Phi \rangle, \quad (2.23)$$

le contrazioni sono equivalenti alle funzioni di Green, o propagatori della teoria libera.

Le (2.22) definiscono rispettivamente le linee di particella ( $q > k_F$ ) e di lacuna, o *hole*, ( $q < k_F$ ) che si propagano tra le linee di interazione.

### 2.2.3 Le integrazioni temporali

L'ultimo passo è eseguire le integrazioni temporali della (2.18). Ogni termine dello sviluppo contiene una successione di interazioni, ordinata temporalmente dal T-prodotto. In generale il termine n-esimo dello sviluppo presenterà  $n!$  possibili ordinamenti temporali. Stabilito un ordinamento temporale, la dipendenza dal tempo in realtà è triviale, poiché una qualsiasi combinazione di operatori di creazione e distruzione applicata allo stato imperturbato  $\Phi$  genera ancora un autostato di  $H_0$ . Per questo ad ogni elemento  $H_I(t)$  si può associare un fattore  $e^{i\Delta E t}$  dove  $\Delta E$  è la differenza di energia tra lo stato iniziale e lo stato finale dell'interazione. Ad esempio ad un elemento di matrice  $\langle rs|v|mn\rangle$  corrisponde un fattore di fase che contiene  $\Delta E = E_m + E_n - E_r - E_s$ . L'effetto delle contrazioni è connettere le linee di interazione e selezionare operatori che hanno lo stesso impulso, corrispondente all'impulso di una particella ( $k > k_F$ ) o di una *hole* ( $k < k_F$ ) che si propaga tra le interazioni. Ripristinando i fattori  $e^{-\epsilon t}$  e passando alle coordinate relative  $\tau_1 = t_1, \tau_2 = t_2 - t_1 \dots$ , il risultato delle integrazioni temporali porta a

$$E - E_0 = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \sum_{n, \text{linked}} \left\langle \Phi \left| H_1 \frac{1}{E_0 - H_0 + i n \epsilon} \right. \right. \\ \left. \left. \times H_1 \frac{1}{E_0 - H_0 + i(n-1)\epsilon} H_1 \cdots \frac{1}{E_0 - H_0 + i\epsilon} H_1 \right| \Phi \right\rangle, \quad (2.24)$$

dove le quantità a denominatore  $E_0 - H_0$  stanno ad indicare  $\Delta E$  associato ad ogni linea di interazione. A questo punto si può calcolare il limite  $\epsilon \rightarrow 0$ : i denominatori non possono essere divergenti dal momento che lo stato di vuoto non può comparire come stato intermedio di diagrammi connessi. Lo shift in energia risultante è

$$\Delta E = \sum_n \left\langle \Phi \left| H_1 \left[ \frac{1}{E_0 - H_0} H_1 \right]^n \right| \Phi \right\rangle_{\text{connessi}}, \quad (2.25)$$

e si ottiene sommando tutti i diagrammi connessi che hanno  $\Phi$  come stato iniziale e finale. Allo stesso modo alla funzione d'onda

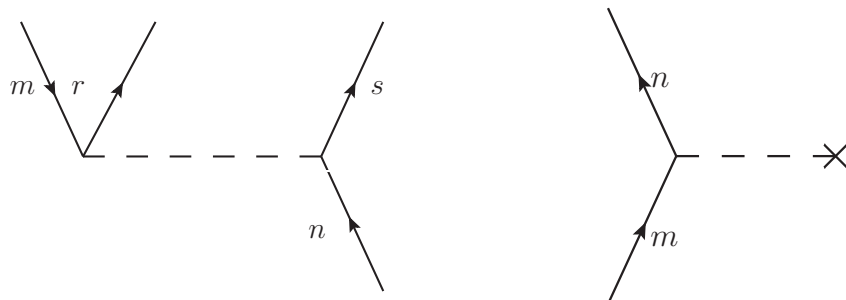
$$|\Psi\rangle = \sum_n \left[ \frac{1}{E_0 - H_0} H_1 \right]^n |\Phi\rangle_{\text{connessi}}, \quad (2.26)$$

contribuiscono tutti i diagrammi connessi che iniziano con  $\Phi$  e terminano con due linee esterne.

## 2.3 I diagrammi di Goldstone

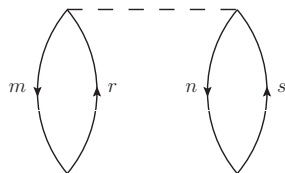
Ogni ordinamento temporale è rappresentabile graficamente con un diagramma di Goldstone, il cui elemento base è riportato nella Fig. 2.2(a).

La linea tratteggiata rappresenta l'interazione, ovvero l'elemento di matrice  $\langle rs|v|mn\rangle$ , le linee uscenti  $r$  e  $s$  corrispondono agli operatori di creazione che stanno

(a) Un diagramma  $\langle rs|v|mn\rangle$ (b) Un diagramma  $\langle n|V|m\rangle$ **Figura 2.2.** Gli elementi base dei diagrammi di Goldstone.

a sinistra degli elementi di matrice, mentre le linee  $n$  e  $m$ , entranti, sono associate agli operatori di distruzione, posizionati a destra degli elementi di matrice. Il grafico rappresenta una transizione da uno stato non eccitato  $\psi_m$  ad uno stato eccitato  $\psi_r$ , mentre una particella effettua una transizione tra gli stati eccitati  $\psi_n$  e  $\psi_s$ . Per come è stato definito l'operatore a due corpi  $\langle rs|v|mn\rangle$ , nella rappresentazione grafica le linee  $r$  e  $m$  devono incontrarsi nel vertice a sinistra, le linee  $s$  e  $n$  all'estremità destra della linea tratteggiata.

Un tipico diagramma di Goldstone di ordine due in  $v$  è rappresentato in Fig. 2.3

**Figura 2.3.** Un diagramma di Goldstone del secondo ordine.

Aver scelto l'asse temporale orientato dal basso verso l'alto vuol dire ordinare le interazioni nella stessa direzione. La linea tratteggiata in basso rappresenta lo stato iniziale  $\Phi$ . Con la prima applicazione di  $H_1$  si ottiene come stato intermedio il determinante di Slater con 2 particelle negli stati eccitati  $r$  e  $s$  e due *holes* in  $m$  e  $n$ . Questo stato si propaga con l'operatore  $(E_0 - H_0)^{-1}$ , che misura il reciproco della differenza di energia rispetto allo stato fondamentale. Considerando lo stato fondamentale come stato di vuoto, il contributo dell'operatore  $(E_0 - H_0)^{-1}$ , su ogni stato intermedio, è pari alla somma delle energie delle particelle meno la somma delle energie delle lacune, con un fattore moltiplicativo  $-1$  dovuto al segno negativo davanti a  $H_0$ .

Con le successive applicazioni di  $H_1$  e  $(E_0 - H_0)^{-1}$ , il contributo di un singolo diagramma si ottiene infine da

- un prodotto di elementi di matrice;
- un valore di aspettazione sullo stato fondamentale degli operatori di creazione e distruzione associati agli elementi di matrice;
- un denominatore con il prodotto delle energie degli stati virtuali intermedi.

L'ordine con cui compaiono gli operatori di creazione e distruzione determina il segno del diagramma. Nella costruzione degli stati intermedi, infatti, questi non sono stati antisimmetrizzati, il che comporta un segno esplicito associato ad ogni diagramma. Questo è dato da  $(-1)^{l+h}$  dove  $h$  è il numero di lacune e  $l$  il numero di loop chiusi ed è conseguenza del numero di permutazioni degli operatori necessarie a ricostruire le linee disegnate. Va inoltre considerato il segno meno che accompagna ogni denominatore, che determina un ulteriore fattore  $(-1)^e$ , dove  $e$  indica il numero di interazioni di tipo  $v$ . Considerando il secondo termine in  $H_1$ , l'ultimo contributo al segno totale è dato dal numero  $u$  di interazioni con potenziale di singola particella tramite il fattore  $(-1)^u$ . In Fig. 2.2(b) è riportato un esempio di interazione in cui compare il potenziale di singola particella  $\langle n|V|m\rangle$ .

Le correzioni all'ordine  $n$  all'energia e alla funzione d'onda sono quindi esprimibili come somma di tutti i diagrammi a  $n$  vertici collegati in tutti i modi possibili tramite linee di particelle e lacune. Ogni diagramma di Goldstone corrisponde ad un ordinamento temporale, pertanto all'ordine  $n$  ci saranno  $n!$  diagrammi distinti. Tra questi vanno selezionati quelli topologicamente differenti. Grazie al teorema di Wick si può sommare liberamente su tutti gli stati intermedi, anche su stati uguali, violando apparentemente il principio di esclusione di Pauli. Come si vedrà in seguito, se si considerano tutti i possibili diagrammi i contributi dei termini con due particelle nello stesso stato intermedio si cancellano. Dalla somma sugli stati intermedi, la conservazione dell'impulso ad ogni vertice fa in modo che alla fine resti soltanto la conservazione dell'impulso totale, condizione che equivale a richiedere che lo shift in energia abbia una dipendenza dal volume, ovvero al prodotto  $\rho N$ .

Stabilite le regole diagrammatiche, è importante notare che le particelle che occupano gli stati non eccitati, pur non essendo rappresentate esplicitamente nei diagrammi, intervengono nelle interazioni e hanno un ruolo chiave nella scelta del potenziale di singola particella.

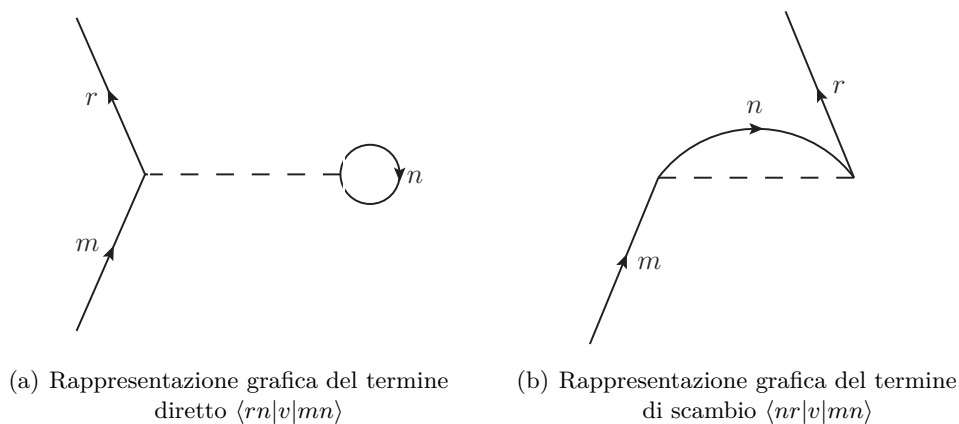
Ad esempio in Fig. 2.4 una particella compie una transizione dallo stato eccitato  $m$  allo stato eccitato  $r$  per effetto dell'interazione con una particella in uno stato non eccitato  $n$ , che resta nello stesso stato di partenza. La particella in  $n$  viene indicata come particella *passiva*. La Fig. 2.4(a) rappresenta il termine diretto corrispondente all'elemento di matrice  $\langle rn|v|mn\rangle$ . Invertendo il ruolo gli stati finali, si ottiene il termine di scambio  $\langle nr|v|mn\rangle$  2.4(b).

Le correzioni al primo ordine all'energia dello stato fondamentale  $\langle \Phi|H_1|\Phi\rangle$  sono dovute esclusivamente alle interazioni tra particelle passive riportate in Fig. 2.5.

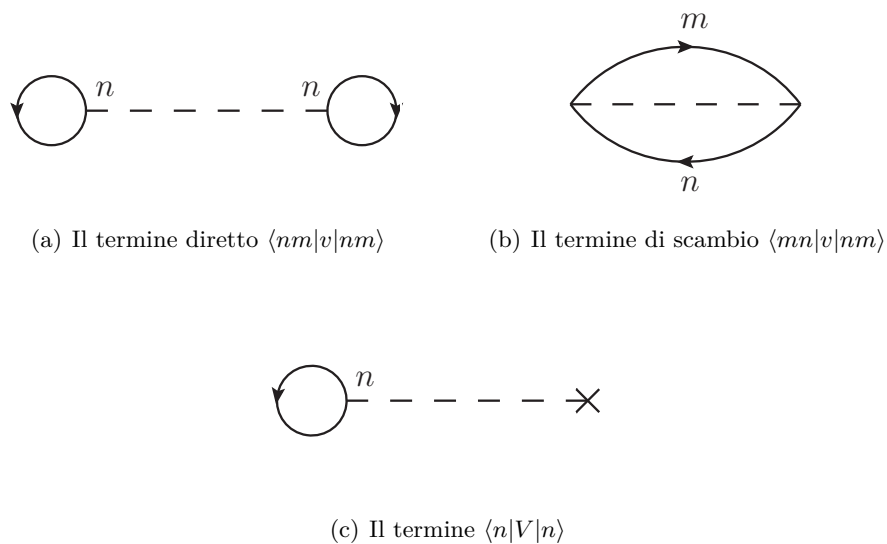
## 2.4 Il metodo di Hartree Fock

L'arbitrarietà della scelta del potenziale di singola particella può risultare uno strumento molto utile per semplificare i calcoli in teoria delle perturbazioni. Con un potenziale ben definito, infatti, alcuni diagrammi possono cancellarsi riducendo





**Figura 2.4.** Le interazioni con le particelle passive.



**Figura 2.5.** Le correzioni all'energia del primo ordine  $\langle \Phi|H_1|\Phi\rangle$ .

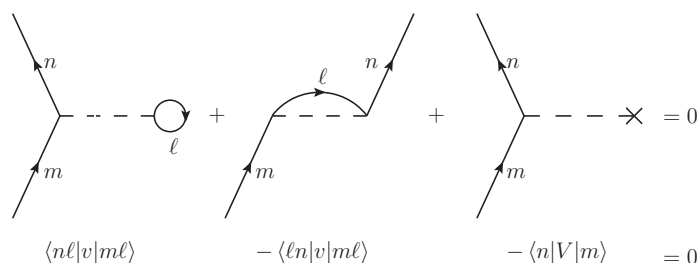
notevolmente il numero di termini da calcolare nell'espansione diagrammatica. La scelta vincente, tuttavia, non è quella che cancella il numero maggiore di contributi, ma quella che permette di trascurare particolari classi di diagrammi.

Ne è un esempio il potenziale di Hartree Fock (HF), definito dalla condizione che il valore di aspettazione di  $H$  sullo stato fondamentale sia stazionario per variazioni delle funzioni d'onda di singola particella. In termini dei digrammi di Goldstone, la scelta di HF corrisponde alla condizione che si annulli la somma dei diagrammi riportati in Fig. 2.6,

$$\sum_{\ell} \{ \langle n\ell|v|m\ell\rangle - \langle \ell n|v|m\ell\rangle \} - \langle n|V|m\rangle = 0, \quad (2.27)$$

da cui si ottiene un potenziale

$$\frac{1}{2} \sum_n \langle n|V|n\rangle = \frac{1}{2} \sum_{n,\ell} \{ \langle n\ell|v|n\ell\rangle - \langle \ell n|v|n\ell\rangle \}. \quad (2.28)$$



**Figura 2.6.** La condizione di Hartree Fock.

La condizione (2.28) fa sì che al primo ordine il valore di aspettazione dell'energia abbia la forma tipica di una teoria di campo medio

$$E = E_0 + \Delta E = \langle n|T|n\rangle + \frac{1}{2} \langle n|V|n\rangle, \quad (2.29)$$

e, soprattutto, consente di trascurare l'intera classe di diagrammi che contiene la somma degli elementi della Fig. 2.6, legati sia a linee di particelle che a linee di lacune. Se si sostituisce la (2.28) nella (2.29) si ottiene una espressione per l'energia che non dipende esplicitamente dal potenziale  $V$  scelto. Tuttavia la scelta del potenziale di singola particella determina gli autostati di singola particella  $n, m$  del mare di Fermi e l'autovalore dello stato fondamentale  $E_0$  (autoconsistenza del metodo HF).

## 2.5 La formulazione di Brueckner, Bethe e Goldstone

Il carattere fortemente repulsivo di alcuni potenziali a due corpi, come nel caso della materia nucleare su cui questa teoria è stata sviluppata, preclude la possibilità di ottenere una serie convergente con un potenziale HF, dal momento che gli elementi di matrice sono determinati principalmente dalla regione di *core* fortemente repulsivo.

L'evoluzione naturale dell'espansione di Goldstone prevede di sostituire il potenziale a due corpi con una quantità regolare e ben definita anche per potenziali divergenti, che tenga conto dello sviluppo a tutti gli ordini in  $v(ij)$ , come nel problema dello scattering di due nucleoni in presenza di altre particelle. I diagrammi, infatti, sono riorganizzati in modo che ogni elemento di matrice di  $v(ij)$  sia sostituito da una serie infinita di termini, esprimibile attraverso la matrice di reazione che risolve l'equazione di Schrödinger per lo scattering di nucleoni nella materia nucleare.

### 2.5.1 La matrice di reazione

Riorganizzare i diagrammi dell'espansione di Goldstone e sostituire ad ogni elemento  $v$  una serie infinita di termini che descrive l'interazione a tutti gli ordini è un modo di procedere analogo a quello utilizzato per risolvere il problema dello scattering nucleone-nucleone nel vuoto. In entrambi i casi si ottiene una descrizione del processo tramite la matrice di reazione, introdotta proprio come soluzione dell'equazione di Schrödinger per lo scattering di due particelle.

La derivazione della matrice di reazione per la teoria dello scattering è riportata in Appendice E. Il risultato principale che ne deriva è un'ampiezza totale di scattering finita, nonostante il potenziale sia intenso e singolare. E' interessante notare, infatti, che per potenziali *hard core* il primo termine dello sviluppo perturbativo dell'ampiezza di scattering è divergente perché è dato dalla trasformata di Fourier del potenziale. Tuttavia lo sviluppo in onde parziali dell'ampiezza totale resta finito a tutti gli ordini della teoria delle perturbazioni. Questa proprietà si può spiegare risolvendo l'equazione di Schrödinger di due particelle in interazione

$$\left(\nabla^2 + k^2\right) \psi(\mathbf{x}) = v(\mathbf{x})\psi(\mathbf{x}) , \quad (2.30)$$

con  $v(\mathbf{x}) = mV(\mathbf{x})$ , la cui funzione di Green è data dalla (E.4). La soluzione risulta dalla somma dell'onda incidente più un'onda diffusa uscente

$$\psi_{\mathbf{k}}^+ = e^{i\mathbf{k}\mathbf{x}} - \int d\mathbf{x}' G^+(\mathbf{x}, \mathbf{x}') v(\mathbf{x}') \psi_{\mathbf{k}}^+(\mathbf{x}') . \quad (2.31)$$

Dal comportamento asintotico della funzione d'onda  $\psi^+(x)$

$$\psi_{\mathbf{k}}^+(\mathbf{x}) \sim e^{i\mathbf{k}\mathbf{x}} + f(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \frac{e^{i\mathbf{k}'\mathbf{x}}}{x} , \quad (2.32)$$

si definisce l'ampiezza di scattering da un vettore d'onda iniziale  $\mathbf{k}$  a un vettore d'onda finale  $\mathbf{k}'$

$$f(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = -\frac{1}{4\pi} \int d\mathbf{x}' e^{-i\mathbf{k}\mathbf{x}'} v(\mathbf{x}') \psi_{\mathbf{k}}^+(\mathbf{x}') , \quad (2.33)$$

che non può essere divergente perché nella regione dell'*hard core* la funzione d'onda esatta  $\psi^+$  deve annullarsi. In sintesi, è il prodotto  $v\psi^+$  ad essere ben definito e garantire la finitezza dell'ampiezza di diffusione.

Per avere un risultato corretto per lo scattering, quindi, è necessario conoscere la soluzione esatta dell'equazione di Lippmann-Schwinger,  $\psi^+$ , che include infiniti ordini della teoria delle perturbazioni.

In un sistema a molte particelle l'equazione di Schrödinger per ogni coppia di fermioni è identica al caso libero, la presenza del mezzo si manifesta nella riduzione

dello spazio delle fasi a disposizione per le onde uscenti poiché le particelle che non intervengono nell'interazione limitano gli stati intermedi accessibili a quelli fuori dal mare di Fermi. La soluzione esatta del problema a due corpi nel mare di Fermi è data dall'equazione di Bethe-Goldstone (E.12).

La differenza rispetto alla diffusione libera consiste nel definire una equazione integrale lievemente differente per la matrice di reazione nella materia, con un operatore di Pauli  $Q$  che proietta sugli stati non occupati fuori dal mare di Fermi. L'effetto dell'operatore di Pauli è di escludere la singolarità del nucleo integrale dalla regione di integrazione. In sintesi il ruolo della matrice  $G$  è quello di sommare le interazioni tra particelle a tutti gli ordini. Introdurre la matrice di reazione è equivalente a calcolare la funzione d'onda  $\Psi$  dalla funzione modello  $\Phi$  della teoria libera tramite la

$$\Psi = \Phi - \frac{Q}{e} v \Psi , \quad (2.34)$$

che implica che il potenziale reale applicato alla funzione d'onda reale non è divergente e che

$$v \Psi = G \Phi . \quad (2.35)$$

### 2.5.2 La teoria di Brueckner

Ogniqualevolta in un diagramma compare una linea di interazione  $v(i, j)$ , esistono diagrammi agli ordini successivi che hanno più linee di interazione tra gli stessi stati iniziali e finali del digramma all'ordine più basso. In alcuni casi i diagrammi con un numero crescente di linee di interazione sono tutti dello stesso ordine e possono essere sommati e rappresentati con un termine unico. Lo scopo della teoria di Brueckner è appunto individuare e sommare i termini simili.

Dalla serie perturbativa, nella formulazione RS, si scopre che le correzioni all'energia dovute ai diagrammi in cui compaiono linee di interazione  $v$  tra due linee di particelle sono tutte proporzionali a  $N\rho$ , indipendentemente dal numero di interazioni. Diagrammi di questo tipo, con un numero variabile di linee di particelle e un numero costante di linee che rappresentano lacune *holes*, sono chiamati diagrammi a scala (*ladder diagrams*), e possono essere sommati tramite l'introduzione della matrice di reazione.

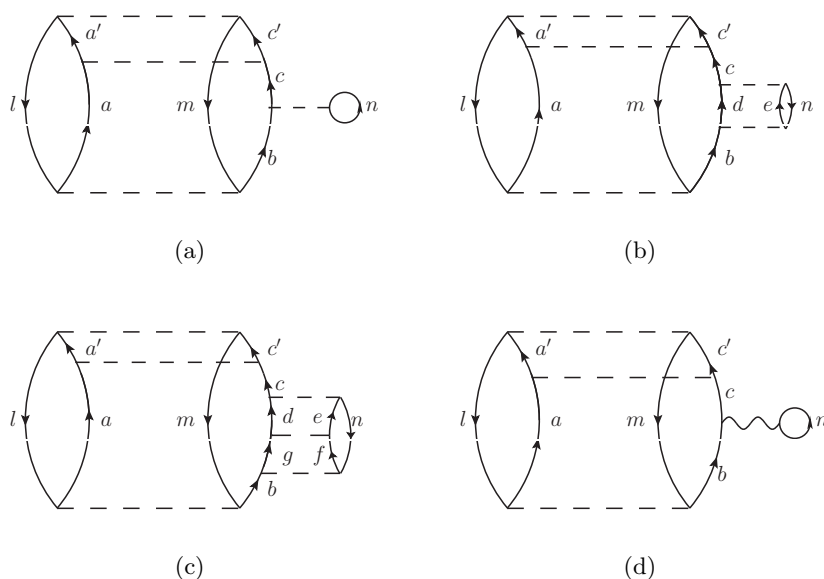
Ad esempio, nella Fig. 2.7 i diagrammi hanno una parte comune e differiscono nel numero di interazioni lungo la linea della particella a destra. Concentrandoci su questo settore del diagramma, è possibile esprimere la somma di tutti i contributi introducendo un nuovo elemento grafico (linea ondulata) che rappresenta la matrice di reazione. Nella somma sugli stati intermedi i denominatori tengono conto dell'energia di tutte le particelle e le lacune del diagramma, anche di quelle non interessate dalla catena di interazioni che si stanno sommando. L'energia di questi stati spettatori definisce la variabile da cui dipende la matrice di reazione.

Nell'esempio della Fig. 2.7, i contributi dei diagrammi

$$\langle cn|v|bn \rangle \quad (2.36a)$$

$$- \sum_{d,e>k_F} \langle cn|v|de \rangle \frac{1}{E_d + E_e - E} \langle de|v|bn \rangle \quad (2.36b)$$

$$- \sum_{d,e,f,g>k_F} \langle cn|v|de \rangle \frac{1}{E_d + E_e - E} \langle de|v|fg \rangle \frac{1}{E_f + E_g - E} \langle fg|v|bn \rangle , \quad (2.36c)$$



**Figura 2.7.** I diagrammi ladder lungo una linea fermionica [21].

definiscono la matrice  $G(E)$  rappresentata nella Fig. 2.7(d) con

$$E = E_l + E_m + E_n - E_a . \quad (2.37)$$

In generale nel selezionare i diagrammi *ladder* si deve tener conto che gli stati intermedi possono essere soltanto stati eccitati e che questi non devono avere interazioni con gli altri stati del diagramma. Le linee di tipo lacuna negli stati intermedi, infatti, non danno contributi di ordine  $N\rho$  ma sono responsabili di contributi con potenze più alte della densità. Il numero di lacune presenti in un diagramma determina l'ordine in potenze della densità e questo comportamento differente tra particelle e lacune è responsabile dell'appellativo *hole-line expansion* attribuito all'espansione di Brueckner, Bethe e Goldstone (BBG), che sarà analizzata nella prossima Sezione.

Tramite l'operatore di Pauli  $Q$ , che tiene conto del principio di esclusione restringendo la somma agli stati non occupati al di sopra della superficie di Fermi, e l'operatore  $e$ , che misura la differenza tra l'energia dello stato di due due particelle e l'energia iniziale  $E$

$$Q |pq\rangle = \begin{cases} |pq\rangle & \text{se } p, q > k_F , \\ 0 & \text{altrimenti} \end{cases} \quad (2.38)$$

$$e |pq\rangle = (E_p + E_q - E) |pq\rangle ,$$

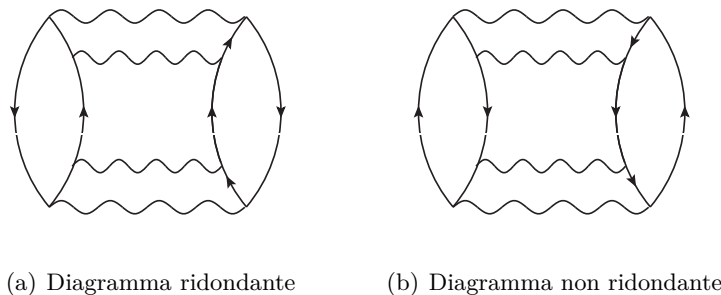
la matrice di reazione  $G$  si può esprimere come somma di infiniti termini in  $v$

$$G(E) = v - v \frac{Q}{e} v + v \frac{Q}{e} v \frac{Q}{e} v + \dots \quad (2.39)$$

o in modo compatto attraverso l'equazione integrale

$$G(E) = v - v \frac{Q}{e} G(E) \quad (2.40)$$

Sommando i diagrammi *ladder*, quindi, i diagrammi di Goldstone possono essere riadattati sostituendo le linee tratteggiate con nuove linee che rappresentano la matrice di reazione. Lo scopo è di sostituire tutte le linee  $v$  e convertire tutti gli elementi di matrice in elementi di matrice di  $G$ , regolare nonostante la divergenza del potenziale, facendo attenzione alla possibilità di incorrere in diagrammi ridondanti, come ad esempio quello riportato in Fig. 2.8(a). Ancora una volta l'asimmetria tra particelle e lacune, fa sì che il diagramma in cui tra le linee di  $G$  si propagano lacune 2.8(b) sia invece da prendere in considerazione.



**Figura 2.8.** I diagrammi con la matrice di reazione  $G$ .

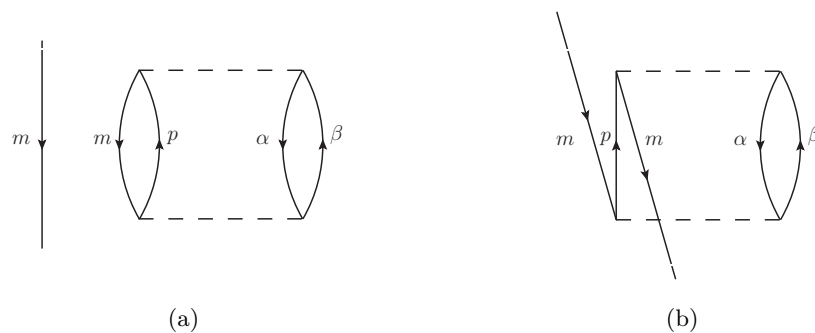
Sono sicuramente sostituibili con  $G$  la prima e l'ultima linea di interazione di ogni digramma. Su queste linee e ogniqualvolta la matrice  $G$  è calcolata sull'energia delle particelle iniziali o delle particelle finali, la matrice  $G$  è *on-shell*. Per  $E$  diverso dalle energie iniziali e finali, la matrice  $G$  è calcolata *off-shell*.

La somma di classi di diagrammi equivalenti permette anche di risolvere una apparente violazione del principio di esclusione di Pauli come conseguenza dell'espansione in diagrammi connessi. Tralasciando la matrice di reazione, si prendano in considerazione i diagrammi della Fig. 2.9. Poiché nel processo di espansione gli stati intermedi non sono antisimmetrizzati, è possibile generare diagrammi che violano il principio di esclusione avendo due particelle nello stesso livello. Considerando tutti i diagrammi, connessi e non, la violazione non rappresenterebbe un problema, dal momento che ogni diagramma 2.9(b) verrebbe cancellato dall'equivalente diagramma di scambio 2.9(a). Questa cancellazione diventa impossibile con una espansione ristretta ai diagrammi connessi. La soluzione al problema viene dalla somma dei diagrammi *ladder* che convergono nell'elemento con autoenergia nella Fig.2.10 .

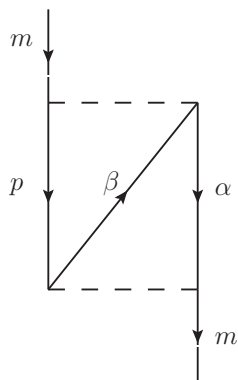
La sostituzione di tutte le linee con elementi di matrice  $G$  definisce l'espansione BBG.

### 2.5.3 Espansione *Hole-line*

Resta da determinare la forma del potenziale di singola particella da una condizione equivalente alla (2.6) con la matrice  $G$  al posto di  $v$ . Per determinare la matrice di reazione in modo autoconsistente, la questione importante è la dipendenza di  $G$  dall'energia iniziale  $E$ . Secondo [22] la scelta migliore per  $k_m < k_F$  è data dall'energia



**Figura 2.9.** Un diagramma che viola il principio di esclusione di Pauli (b) e il diagramma disconnesso (a) che ha gli stessi elementi di matrice ma segno opposto. Se si considerassero tutti i possibili diagrammi, (b) e (a) si compenserebbero.

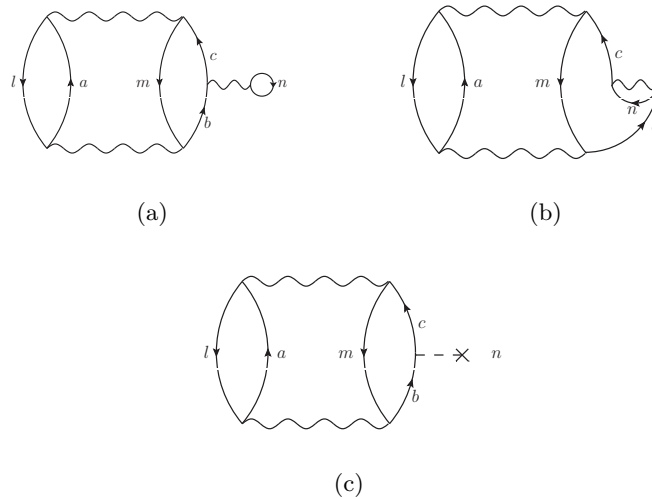


**Figura 2.10.** Come riottenere il principio di esclusione di Pauli: i diagrammi che violano il principio di Pauli convergono nelle correzioni ai propagatori determinate dall'autoenergia.

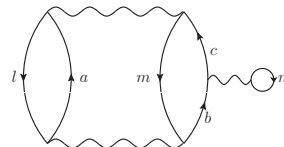
iniziale del diagramma in Fig. 2.12 per  $b = c$

$$V(k_b) = \langle b|V|b \rangle = \sum_{n \leq N} \langle bn|G(E = E_b + E_n)|bn \rangle_a . \quad (2.41)$$

Con questa scelta, infatti, è garantita la cancellazione dei diagrammi 2.11 per la matrice  $G$  con una condizione equivalente alla scelta di HF, insieme ad una classe più ampia di diagrammi.



**Figura 2.11.** La condizione di Hartree Fock per la matrice  $G$ .



**Figura 2.12.** La matrice  $G$  on shell.

Nonostante la cancellazione dei diagrammi tipo HF, il problema di autoconsistenza per la matrice  $G$  è non banale, dal momento che la stessa matrice  $G$  dipende dal potenziale  $V$  tramite l'energia dello stato iniziale.

La scelta del potenziale di singola particella, inoltre, apre la questione legata alla convergenza dell'espansione in potenze di  $G$ . Ammettendo che la serie in  $G$  converga, considerare ordini più alti nello sviluppo in serie dovrebbe portare ad una approssimazione migliore, ma non è detto che questo succeda selezionando soltanto alcune classi di diagrammi nello sviluppo perturbativo.

Nel caso della matrice  $G$  la serie non è convergente. Lo si può vedere inserendo una linea  $G$  tra due linee di particella in un generico diagramma. Il rapporto tra il diagramma modificato e quello iniziale è di ordine uno, a dimostrazione che



aumentare le potenze di  $G$  non può rendere convergente la serie. Aumentando il numero di *holes*, invece, ad esempio inserendo una interazione *bubble* su una linea di particella, il rapporto è proporzionale alla densità  $\rho$  [23].

Da queste considerazioni qualitative si può desumere che la dimensione di un diagramma non è data dal numero di linee  $G$  ma dal numero di lacune presenti e che l'espansione BBG è una espansione in densità. Per questo motivo i diagrammi sono classificati in base al numero di linee *holes* indipendenti: il termine dominante è il primo ordine in  $G$  perché contiene due lacune, mentre gli ordini successivi ne hanno almeno tre o più<sup>2</sup>.

## 2.6 Confronto con l'approccio variazionale

È stato più volte sottolineato come il numero di linee associate a stati del mare di Fermi (*hole lines*) sia indicativo dell'ordine dello sviluppo perturbativo della teoria BBG. Formalmente il parametro che determina la convergenza dell'espansione è dato dalla quantità

$$\begin{aligned}\kappa &= \frac{1}{N} \sum_{j>i} \int \left| \phi_{ij}(r_{12}) - \psi_{ij}^{BG}(r_{12}) \right|^2 d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 \\ &= \rho \sum_{j>i} \int \left| \phi_{ij}(r) - \psi_{ij}^{BG}(r) \right|^2 d^3r ,\end{aligned}\quad (2.42)$$

dove  $\phi_{ij}$  è la funzione d'onda imperturbata del sistema di due particelle, prodotto delle funzioni d'onda di singola particella, e  $\psi_{ij}^{BG}$  è la corrispondente funzione d'onda correlata, definita attraverso la matrice di reazione  $G$  (cfr. eq.(2.34)). Il parametro  $\kappa$  essenzialmente fornisce una misura della probabilità di trovare uno stato non occupato all'interno del mare di Fermi, Per questo motivo un diagramma con  $n$  linee di tipo *hole* sarà proporzionale a  $\kappa^{n-1}$ .

Nel metodo variazionale, invece, si usa come parametro dell'espansione in clusters la quantità<sup>3</sup>

$$\xi = \frac{1}{N} \sum_{ij} \langle ij | F^\dagger(12) F(12) - 1 | ij \rangle_a = \rho \int \left[ f(r)^2 - 1 \right] \left[ 1 - \frac{1}{\nu} \ell^2(k_F r) \right] d^3r , \quad (2.43)$$

indice di quanto il sistema si discosti dalla configurazione in assenza di correlazioni ( $f^2(r) \equiv 1$ ). Entrambe le misure sono collegate al range e all'intensità della correlazione a due corpi, tuttavia non sono perfettamente equivalenti. La prima, infatti, rappresenta una probabilità ed è, di conseguenza, una quantità definita positiva, la seconda lo diventa soltanto sotto la condizione

$$\frac{1}{N} \sum_{ij} \langle ij | 1 - F(12) | ij \rangle_a = 0 , \quad (2.44)$$

il cui significato fisico si comprende facilmente identificando la funzione di due particelle correlate con la soluzione dell'equazione di Bethe-Goldstone (cfr. Appendice

<sup>2</sup>Nel contare le linee indipendenti si deve tener conto della conservazione dell'impulso.

<sup>3</sup>Usiamo la notazione  $|ij\rangle = \phi_{ij}$ ,  $|ij\rangle_a = (\phi_{ij} - \phi_{ji})/\sqrt{2}$ , con  $i, j \in \{F\}$ .

E), ponendo cioè  $F(12) |ij\rangle_a = \psi_{ij}^{BG}$ , e notando che, per ogni coppia di stati  $i, j \in \{F\}$ , la  $\psi_{ij}^{BG}$  soddisfa la

$$\rho \int \phi_{ij}^*(r) [\phi_{ij}(r) - \psi_{ij}^{BG}(r)] d^3r = \rho \int \phi_{ij}^*(r) \chi_{ij}(r) d^3r = 0 . \quad (2.45)$$

Questa relazione segue dall'imposizione del principio di Pauli, che richiede che la funzione  $\chi_{ij} = \phi_{ij} - \psi_{ij}^{BG}$  sia ortogonale alla funzione d'onda che descrive due particelle libere del mare di Fermi. Naturalmente, poichè la  $f(r)$  dipende solo della distanza relativa tra le due particelle correlate, e non dagli stati quantistici che esse occupano, nell'approccio variazionale la condizione (2.45) si può applicare solo in media, cioè attraverso la (2.44).

Si possono anche confrontare direttamente l'approccio perturbativo e quello variazionale analizzando le correzioni all'energia dello stato fondamentale che si ottengono dai due schemi ad un dato ordine. In entrambi gli approcci l'energia per particella si può scrivere nella forma

$$\frac{E}{N} = T_F + (\Delta E)_2 , \quad (2.46)$$

dove  $T_F = 3k_F^2/10m$  è l'energia del gas di Fermi. Nel formalismo CBF  $(\Delta E)_2$  è la correzione all'energia del gas di Fermi che si ottiene considerando il termine a due particelle dell'espansione in clusters, cioè

$$(\Delta E)_2 = \frac{1}{2} \sum_{ij} \langle ij | V_{\text{eff}} | ij \rangle_a , \quad (2.47)$$

con il *potenziale effettivo* definito dalla

$$V_{\text{eff}}(r_{ij}) = \sum_{i < j} f^\dagger(r_{ij}) \left[ -\frac{1}{m} (\nabla^2 f(r_{ij})) - \frac{2}{m} (\nabla f(r_{ij}) \cdot \nabla + v(r_{ij}) f(r_{ij})) \right] , \quad (2.48)$$

mentre nella teoria perturbativa  $(\Delta E)_2$  è il contributo dei diagrammi con due *hole lines*

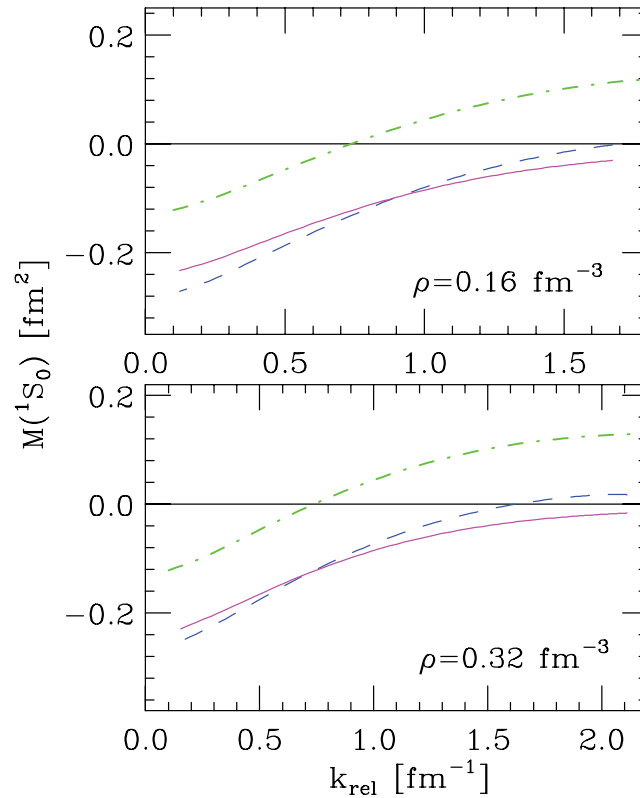
$$(\Delta E)_2 = \frac{1}{2} \sum_{ij} \langle ij | G | ij \rangle_a , \quad (2.49)$$

con la matrice  $G$  definita dalle eq.(2.34) e (2.35).

Benchè il confronto tra la (2.47) e la (2.49) suggerisca immediatamente l'identificazione di  $V_{\text{eff}}$  con  $G$ , questa relazione non può essere implementata a livello operatoriale. Per convincersi di questo basta considerare che la matrice di reazione ha una dipendenza esplicita dall'energia, assente nel potenziale effettivo  $V_{\text{eff}}$ . Questo, a sua volta, oltre a dipendere dal potenziale *nudo*  $v$ , contiene termini puramente cinetici, con derivate della funzione di correlazione, mentre la matrice  $G$  è determinata soltanto da  $v$ .

In [24], gli autori hanno confrontato gli approcci perturbativo e variazionale analizzando gli elementi di matrice di  $V_{\text{eff}}$  e  $G$  che contribuiscono all'ampiezza di diffusione neutrone-neutrone nella materia neutronica. In questo sistema, l'interazione è dipendente dallo spin, e quindi lo devono essere anche le funzioni di correlazione. Il calcolo dell'energia richiede l'uso di un formalismo più complesso di quello descritto nel Capitolo 1, ma concettualmente del tutto analogo.

L'ampiezza di diffusione è stata sviluppata in onde parziali, per isolare i contributi associati ai diversi stati di momento angolare. La Fig. 2.13 riporta le ampiezze calcolate con il potenziale effettivo ottenuto dal formalismo CBF e con la matrice  $G$  per coppie di neutroni in stato di momento angolare  $\ell = 0$ , in funzione dell'impulso relativo  $k_{\text{rel}}$ . I due pannelli corrispondono a valori diversi di densità della materia neutronica<sup>4</sup>. Per confronto, nella Fig. 2.13 è riportata anche l'ampiezza di diffusione nel vuoto. Si vede chiaramente che i due approcci predicono ampiezze di diffusione la cui differenza è molto minore dell'effetto del mezzo nucleare.



**Figura 2.13.** Le ampiezze di diffusione calcolate con il potenziale effettivo ottenuto con la teoria CBF (linea continua) e con la matrice  $G$  (linea tratteggiata), confrontate con l'ampiezza di diffusione nel vuoto (linea tratto e punto) [24].

<sup>4</sup> $\rho = 0.16 \text{ fm}^{-3}$  è il valore della densità centrale che si osserva nei nuclei atomici.

---

Il metodo variazionale nel formalismo dei *path integrals*

---

In questo Capitolo verrà presentato un metodo alternativo per la trattazione dei sistemi a molti corpi fortemente correlati, che permetterà di mettere direttamente in relazione gli approcci variazionale e perturbativo discussi nei Capitoli precedenti. Questo metodo è basato sull'uso del formalismo degli integrali sui cammini di Feynman e sull'idea di spostare l'oggetto del calcolo variazionale dalla funzione d'onda del sistema alla sua hamiltoniana, attraverso la quale gli integrali sui cammini vengono definiti [25, 26]. Il vantaggio di questa formulazione consiste nella possibilità di estendere la trattazione variazionale a teorie in cui il sistema oggetto di studio non può essere descritto da una funzione d'onda.

Dimostreremo che nell'ambito del formalismo degli integrali sui cammini si può derivare un principio variazionale generale, di cui il principio di Raileigh-Ritz è un caso particolare, e che i digrammi associati ai termini dell'espansione FHNC si possono riottenere nel nuovo approccio.

### 3.1 Il principio variazionale

L'energia libera  $F$  di un sistema è legata alla funzione di partizione dalla relazione

$$Z = e^{-\beta F} , \quad (3.1)$$

e la funzione di partizione può essere calcolata come integrale sui cammini periodici, come illustrato nell'Appendice F.

$$Z = \int_{-\infty}^{\infty} dx_a \int_{x_a}^{x_a} \mathcal{D}x(\tau) e^S . \quad (3.2)$$

In questo capitolo si farà riferimento al fattore di fase come “azione” e al parametro  $\tau$  come “tempo” anche se nessuna delle due quantità corrisponde esattamente all'appellativo assegnato. L'ambiguità deriva dall'aver definito un'ampiezza di probabilità a tempi immaginari (cfr. Appendice F), e quindi il parametro  $\tau$  è un tempo generalizzato e l'azione è il risultato della rotazione di Wick  $t \rightarrow -i\tau$  nella definizione di azione  $S$ . Solitamente la si definisce azione euclidea  $S_E$ , ovvero

integrale in  $d\tau$  della lagrangiana euclidea  $L_E$ . Le azioni verranno considerate in unità di  $\hbar$  e si considereranno lagrangiane non dipendenti esplicitamente dal tempo.

In questo paragrafo si vuole presentare un metodo per stimare la funzione di partizione, applicabile al caso di azioni euclidee reali.

Il metodo fa riferimento alla proprietà delle funzioni convesse detta disuguaglianza di Jensen, da cui la richiesta che  $S_E$  sia reale. In generale la convessità della funzione esponenziale  $f(x) = e^x$  implica che la funzione è sempre al di sopra della retta  $y = e^{\bar{x}}(x + 1 - \bar{x})$  tangente alla curva stessa nel punto  $\bar{x}$ , cioè

$$e^x \geq e^{\bar{x}}(x + 1 - \bar{x}) . \quad (3.3)$$

La disuguaglianza vale anche per l'esponenziale di una generica funzione integrabile  $F(z)$

$$e^{F(z)} \geq e^{\bar{x}}(F(z) + 1 - \bar{x}) , \quad (3.4)$$

e, definita una misura  $d\mu = \phi(z)dz$  positiva e tale che  $\int d\mu = 1$ , si ha che

$$\int dz \phi(z) e^{F(z)} \geq e^{\bar{x}} \left[ \int dz \phi(z) F(z) + 1 - \bar{x} \right] , \quad (3.5)$$

per ogni valore di  $\bar{x}$ . In particolare, per  $\bar{x} = \int dz \phi(z) F(z)$  la disuguaglianza per le funzioni convesse implica

$$\int dz \phi(z) e^{F(z)} \geq e^{\int dz \phi(z) F(z)} , \quad (3.6)$$

ovvero, introducendo la notazione  $\langle F \rangle_\phi = \int dz \phi(z) F(z)$

$$\langle e^{F(z)} \rangle_\phi \geq e^{\langle F(z) \rangle_\phi} . \quad (3.7)$$

Sia  $F'$  l'energia libera associata ad una nuova azione  $S'$ , che sia abbastanza semplice da poter calcolare facilmente gli integrali funzionali  $\int \mathcal{D}x(\tau) e^{S'}$  e  $\int \mathcal{D}x(\tau) G e^{S'}$  per funzionali semplici  $G$ , e sia tale che i cammini che contribuiscono in modo predominante alla funzione di partizione  $Z'$  siano gli stessi che contribuiscono in (3.2). Il rapporto delle rispettive funzioni di partizione,

$$\frac{Z}{Z'} = e^{-\beta(F-F')} , \quad (3.8)$$

può essere trasformato grazie alla relazione  $e^S = e^{S-S'} e^{S'}$  nel valore si aspettazione  $\langle e^{S-S'} \rangle$  con peso determinato dall'azione  $S'$

$$e^{-\beta(F-F')} = \frac{\int dx_a \int \mathcal{D}x(\tau) e^{S-S'} e^{S'}}{\int dx_a \int \mathcal{D}x(\tau) e^{S'}} = \langle e^{S-S'} \rangle . \quad (3.9)$$

Dalla disuguaglianza per le funzioni convesse segue che il membro di destra dell'equazione (3.9) può essere maggiorato con l'esponenziale del valore medio dell'esponente

$$\langle e^{S-S'} \rangle \geq e^{\langle S-S' \rangle} , \quad (3.10)$$

con

$$\langle S - S' \rangle = \frac{\int dx_a \int \mathcal{D}x(\tau) (S - S') e^{S'}}{\int dx_a \int \mathcal{D}x(\tau) e^{S'}} . \quad (3.11)$$

Dalla (3.10) segue

$$e^{-\beta(F-F')} \geq e^{\langle S-S' \rangle} , \quad (3.12)$$

che si traduce in una disuguaglianza per l'energia libera

$$F \leq F' - \frac{1}{\beta} \langle S - S' \rangle . \quad (3.13)$$

La relazione

$$F \leq F' - \delta , \quad (3.14)$$

con

$$\delta = \frac{1}{\beta} \langle S - S' \rangle = \frac{\int dx_a \int \mathcal{D}x(\tau) (S - S') e^{S'}}{\int dx_a \int \mathcal{D}x(\tau) e^{S'}} , \quad (3.15)$$

è un principio di minimo per l'energia libera: la migliore stima dell'energia libera è la quantità più piccola che si può ottenere introducendo azioni fittizie  $S'$ . Con azioni che differiscono al primo ordine, si ottiene una differenza di  $F$  da  $(F' - \delta)$  del secondo ordine. Un modo di procedere abbastanza comune è definire azioni di prova  $S'$  a meno di parametri arbitrari, determinabili richiedendo che la migliore stima per  $F$  sia data dai valori che minimizzano la quantità  $(F' - \delta)$ .

Il principio di minimo per  $F$  si traduce in un principio di minimo per l'energia dello stato fondamentale se si considera la definizione di funzione di partizione  $Z = \sum_n e^{-\beta E_n}$  e si tiene conto che al tendere a zero della temperatura l'unico stato popolato è lo stato fondamentale

$$\lim_{\beta \rightarrow \infty} Z = e^{-\beta E_0} . \quad (3.16)$$

A temperature basse, quindi, si può sostituire all'energia libera  $F$  il valore dell'energia dello stato fondamentale, sia per la teoria con  $S$  che con  $S'$ , con il conseguente principio variazionale per l'energia, valido a grandi valori di  $\beta$

$$E_0 \leq E'_0 - \delta . \quad (3.17)$$

Il principio di minimo formulato per l'energia dello stato fondamentale è più semplice rispetto alla versione con l'energia libera, dal momento che a temperatura nulla la dipendenza dalle coordinate della matrice densità si fattorizza completamente.

### 3.1.1 Il principio di Rayleigh-Ritz

Il principio variazionale che abbiamo largamente utilizzato nel Capitolo 1 è il principio di Rayleigh-Ritz (RR), valido per sistemi quantistici all'equilibrio. Secondo questo principio il valore di aspettazione dell'hamiltoniana  $H$  del sistema in uno stato generico  $\psi$  definisce un funzionale

$$E[\psi] = \frac{\langle \psi | H | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle} \quad (3.18)$$

Al variare di  $\psi$  in tutto lo spazio di Hilbert degli stati, lo stato che rende stazionario il funzionale  $E[\psi]$  è un autostato di  $H$  con autovalore  $E$ . Per trasformazioni  $\psi \rightarrow \psi + \delta\psi$ , infatti, si ottiene

$$\delta E = \delta \frac{\langle \psi | H | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle} = \frac{\langle \delta\psi | H - E | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle} = 0 , \quad \forall |\delta\psi\rangle , \quad (3.19)$$

che equivale ad  $H|\psi\rangle = E|\psi\rangle$  in virtù dell'arbitrarietà della variazione  $|\delta\psi\rangle$ .

Conseguenza del principio variazionale di RR è che il valore di aspettazione di  $H$  in uno stato generico  $\psi$  è maggiore o al massimo uguale all'energia  $E_0$  dello stato fondamentale  $\psi_0$

$$E[\psi] \geq E[\psi_0] . \quad (3.20)$$

Questa proprietà si ricava espandendo lo stato in combinazione lineare di autostati dell'hamiltoniana con coefficienti  $a_n$  e riscrivendo il valore di aspettazione di  $H$  come media degli autavalori dell'energia con pesi positivi  $|a_n|^2$

$$E[\psi] = \frac{\sum_n |a_n|^2 E_n}{\sum_n |a_n|^2} , \quad (3.21)$$

In questa forma segue immediatamente la maggiorazione  $E[\psi] \geq E_0$  e la versione standard della condizione di minimo

$$E_0 \leq \frac{\langle \psi | H | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle} . \quad (3.22)$$

Il principio variazionale di RR, come dimostrato da Feynman [27], è un caso particolare del principio variazionale più generale (3.17).

### 3.2 Metodo variazionale alternativo

Data una teoria con Hamiltoniana  $H$ , equivalente ad una lagrangiana euclidea  $L_E \equiv H$ , nel formalismo degli integrali funzionali si definisce la funzione di partizione

$$Z = \int \mathcal{D}\psi \mathcal{D}\psi^\dagger \exp \left\{ - \int_{-\beta/2}^{+\beta/2} L_E[\psi, \psi^\dagger] d\tau \right\} , \quad (3.23)$$

da cui si può ricavare l'energia dello stato fondamentale

$$E_0 = - \lim_{\beta \rightarrow \infty} \frac{\ln Z}{\beta} . \quad (3.24)$$

Il principio variazionale della Sezione 3.1 suggerisce di introdurre una misura funzionale

$$\frac{e^{-\int_{-\beta/2}^{+\beta/2} L_E^0[\psi, \psi^\dagger] d\tau}}{\int \mathcal{D}\psi \mathcal{D}\psi^\dagger \exp \left\{ - \int_{-\beta/2}^{+\beta/2} L_E^0[\psi, \psi^\dagger] d\tau \right\}} , \quad (3.25)$$

tramite la quale definire l'operazione di media sullo spazio funzionale

$$\langle O \rangle_{L_E^0} \equiv \frac{1}{Z_0} \int \mathcal{D}\psi \mathcal{D}\psi^\dagger O[\psi, \psi^\dagger] \exp \left\{ - \int_{-\beta/2}^{+\beta/2} L_E^0[\psi, \psi^\dagger] d\tau \right\} , \quad (3.26)$$

dove  $Z_0$  indica la costante di normalizzazione associata alla misura (3.25)

$$Z_0 = \int \mathcal{D}\psi \mathcal{D}\psi^\dagger \exp \left\{ - \int_{-\beta/2}^{+\beta/2} L_E^0[\psi, \psi^\dagger] d\tau \right\} . \quad (3.27)$$

La scelta della funzione  $L_E^0$  non è vincolata alla richiesta che sia una rappresentazione nello spazio di Fock di una hamiltoniana vera, quindi un operatore hermitiano,

indipendente dal tempo e con uno spettro limitato inferiormente. L'unica caratteristica indispensabile è che sia reale e definita positiva in modo da poter utilizzare la disuguaglianza di Jensen per le funzioni convesse, equazione (3.6). Parimenti si richiede che l'hamiltoniana  $H$ , sia essa ottenuta come trasformazione di Légendre o come prolungamento all'euclideo della lagrangiana  $L$ , sia semplicemente una funzione reale. Identificando

$$\phi(x) \rightarrow \frac{e^{-\int_{-\beta/2}^{+\beta/2} L_E^0[\psi, \psi^\dagger] d\tau}}{\int \mathcal{D}\psi \mathcal{D}\psi^\dagger \exp\left\{-\int_{-\beta/2}^{+\beta/2} L_E^0[\psi, \psi^\dagger] d\tau\right\}}, \quad (3.28)$$

e

$$F(x) \rightarrow -\int dt \left( L_E - L_E^0 \right), \quad (3.29)$$

la disuguaglianza (3.6) si può riscrivere nelle forma<sup>1</sup>

$$\begin{aligned} \int \mathcal{D}\psi \mathcal{D}\psi^\dagger \frac{1}{Z_0} e^{-\int L_E^0[\psi, \psi^\dagger] d\tau} e^{-\int dt (L_E - L_E^0)} \\ \geq \exp\left\{-\int \mathcal{D}\psi \mathcal{D}\psi^\dagger \frac{1}{Z_0} e^{-\int L_E^0[\psi, \psi^\dagger] d\tau} \int dt \left( L_E - L_E^0 \right)\right\}, \end{aligned} \quad (3.30)$$

che implica

$$\frac{Z}{Z_0} \geq \exp - \left\langle \int_{-\beta/2}^{+\beta/2} (L_E - L_E^0) d\tau \right\rangle_{L_E^0}. \quad (3.31)$$

La disuguaglianza delle funzioni convesse si traduce in un principio variazionale per l'energia libera ( si veda la definizione (3.1) )

$$F = -\frac{1}{\beta} \ln Z \leq -\frac{1}{\beta} \ln Z_0 + \frac{1}{\beta} \left\langle \int_{\beta/2}^{\beta/2} d\tau (L_E - L_E^0) \right\rangle_{L_E^0}, \quad (3.32)$$

da cui si ricava, nel limite  $\beta \rightarrow \infty$ , un limite superiore per l'energia dello stato fondamentale

$$E_0 \leq \lim_{\beta \rightarrow \infty} \frac{1}{\beta} \left\{ -\ln Z_0 + \left\langle \int_{-\beta/2}^{+\beta/2} d\tau L_E \right\rangle_{L_E^0} - \left\langle \int_{-\beta/2}^{+\beta/2} d\tau L_E^0 \right\rangle_{L_E^0} \right\}. \quad (3.33)$$

Nella prospettiva di generalizzare l'approccio a teorie effettive, richiedere che  $L_E$  e  $L_E^0$  non siano vere hamiltoniane permette di considerare una possibile dipendenza dal tempo. Questo non preclude la possibilità di semplificare la (3.33) nella forma

$$E_0 \leq E_{var} \equiv \lim_{\beta \rightarrow \infty} \frac{1}{\beta} \left\langle \int_{-\beta/2}^{\beta/2} d\tau L_E \right\rangle_{L_E^0}. \quad (3.34)$$

L'equazione (3.34) individua nell'energia variazionale  $E_{var}$  un limite superiore per l'autovalore dell'energia dello stato fondamentale. Il passaggio fondamentale è la scelta di una funzione peso  $L_E^0$ , con cui calcolare il valore si aspettazione dell'hamiltoniana del sistema,  $H = L_E$ , che tenga conto delle correlazioni tra

<sup>1</sup> Nel seguito, se non esplicitamente indicati, gli estremi di integrazione temporali saranno sempre sottintesi e pari a  $-\beta/2$  e  $+\beta/2$



particelle, come avviene nel metodo variazionale con funzioni d'onda correlate discusso nel Capitolo 1. Scopo di questa trattazione, infatti, è estendere i metodi sviluppati per i sistemi hamiltoniani, in cui si può definire una funzione d'onda dello stato, al caso più generale relativistico, spostando l'approccio variazionale dalla funzione d'onda all'hamiltoniana di prova del sistema. Alla luce dell'espansione FNHC, di cui è necessario riottenere i risultati per dimostrare la validità del metodo, tener conto delle correlazioni tra le particelle in termini di hamiltoniana di prova vuol dire considerare in  $L_E^0$ , contrariamente a quanto si fa della teoria delle perturbazioni *standard*, un termine di interazione a due corpi che riproduca al meglio l'hamiltoniana iniziale.

### 3.3 Determinazione della funzione peso

Il modo più semplice di procedere è considerare in  $L_E^0$  soltanto interazioni a due corpi indipendenti dallo spin. Questa assunzione iniziale è equivalente a scegliere l'*ansatz* BDJ per le funzioni d'onda correlate. Le due formulazioni del principio variazionale, nella versione di Rayleigh-Ritz per le funzioni d'onda correlate (3.20) e nella versione di Feynman (3.34) per gli integrali funzionali, devono essere, infatti, equivalenti. È necessario, quindi, che con una scelta opportuna della lagrangiana di prova  $L_E^0$  la definizione di valore di aspettazione tramite integrali funzionali coincida con il valore di aspettazione sulle funzioni d'onda correlate (1.1),

$$E_{var} = \lim_{\beta \rightarrow \infty} \frac{1}{\beta} \left\langle \int_{-\beta/2}^{\beta/2} d\tau L_E \right\rangle_{L_E^0} \stackrel{?}{=} \frac{\langle \Psi | H | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle}, \quad (3.35)$$

con

$$|\Psi\rangle = F |\Phi\rangle \equiv e^{\mathcal{U}/2} |\Phi\rangle, \quad (3.36)$$

dove  $\hat{F}$  è il fattore di correlazione BDJ,  $\mathcal{U} = \sum_{ij} u(ij) = \sum_{ij} \ln f^2(r_{ij})$  (cfr. eq.(1.6)). Nella (3.35) è stata definita l'energia variazionale

$$E_{var} \equiv \lim_{\beta \rightarrow \infty} \frac{1}{\beta} \left\langle \int_{-\beta/2}^{\beta/2} d\tau L_E d\tau \right\rangle_{L_E^0}. \quad (3.37a)$$

Per semplicità si definisce come  $E_{BDJ}$  il membro di destra dell'equazione

$$E_{BDJ} \equiv \frac{\langle \Psi | H | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle}. \quad (3.37b)$$

L'equivalenza tra le due formulazioni può essere dimostrata a partire dal valore di aspettazione del potenziale di interazione a due corpi

$$\mathcal{V} = \int d^4x d^4y \psi^\dagger(x) \psi^\dagger(y) \mathcal{V}(x, y) \psi(y) \psi(x), \quad (3.38)$$

generalmente diagonale nelle variabili temporali, cioè tale che

$$\mathcal{V}(x, y) = V(|\mathbf{x} - \mathbf{y}|) \delta(x_0 - y_0).$$

Se si indica con  $V(x_0)$  il risultato della prima integrazione temporale

$$V(x_0) = \int d^3x d^3y \psi^\dagger(\mathbf{x}, x_0) \psi^\dagger(\mathbf{y}, x_0) \mathcal{V}(\mathbf{x}, \mathbf{y}) \psi(\mathbf{y}, x_0) \psi(\mathbf{x}, x_0), \quad (3.39)$$

la (3.38) si può scrivere sinteticamente con  $V = \int dx_0 V(x_0)$ . Nel nostro caso l'interazione è anche indipendente dal tempo, perciò il potenziale di interazione a due corpi è dato da  $V = \int dt V = \beta V$ .

Ora si definisce, in analogia con la (3.37), il potenziale variazionale  $V_{var}$  e si vuole dimostrare che con una opportuna scelta della funzione di prova e indipendentemente dalla forma di  $V$ , purché sia un potenziale indipendente dal tempo, vale la relazione

$$V_{var} = \lim_{\beta \rightarrow \infty} \frac{1}{\beta} \left\langle \int_{-\beta/2}^{\beta/2} V d\tau \right\rangle_{L_E^0} = \frac{\langle \Psi | V | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle} = V_{BDJ} . \quad (3.40)$$

Dimostrata la relazione (3.40) per un qualsiasi operatore  $V$ , ne consegue che la parte diagonale della matrice densità a due corpi è la stessa per la formulazione funzionale e per l'*ansatz* di BDJ e, di conseguenza, che coincidono le densità ad un corpo su cui agisce l'operatore energia cinetica.

### 3.4 Equivalenza delle formulazioni variazionali

Lo stato correlato con correlazione BDJ  $|\Psi\rangle = e^{\mathcal{U}/2} |\Phi\rangle$  può essere riscritto introducendo una dipendenza temporale fittizia nel fattore di correlazione

$$\mathcal{U}(t) \equiv \mathcal{U} \quad , \quad \forall t , \quad (3.41)$$

e definendo gli operatori

$$\mathcal{U}^+ \equiv \frac{1}{\beta} \int_0^{\beta/2} \mathcal{U} dt \quad , \quad e \quad \mathcal{U}^- \equiv \frac{1}{\beta} \int_{-\beta/2}^0 \mathcal{U} dt , \quad (3.42)$$

in modo che

$$|\Psi\rangle = \mathcal{T} e^{\mathcal{U}^+} |\Phi\rangle \quad , \quad e \quad \langle \Psi | = \langle \Phi | \mathcal{T} e^{\mathcal{U}^-} . \quad (3.43)$$

Con queste definizioni il valore di aspettazione di  $V$  sulle funzioni correlate,  $V_{BDJ}$ , si riscrive

$$V_{BDJ} = \frac{\left\langle \Phi \left| \mathcal{T} \left( e^{\frac{1}{\beta} \int_{-\beta/2}^0 \mathcal{U} dt} \right) V \mathcal{T} \left( e^{\frac{1}{\beta} \int_0^{\beta/2} \mathcal{U} dt} \right) \right| \Phi \right\rangle}{\left\langle \Phi \left| \mathcal{T} \left( e^{\frac{1}{\beta} \int_0^{\beta/2} \mathcal{U} dt} \right) \mathcal{T} \left( e^{\frac{1}{\beta} \int_{-\beta/2}^0 \mathcal{U} dt} \right) \right| \Phi \right\rangle} , \quad (3.44)$$

che vuol dire, grazie alla natura di  $V$  indipendente dal tempo

$$\langle V \rangle = \frac{\left\langle \Phi \left| \mathcal{T} \left( V e^{\frac{1}{\beta} \int_{-\beta/2}^{\beta/2} \mathcal{U} dt} \right) \right| \Phi \right\rangle}{\left\langle \Phi \left| \mathcal{T} \left( e^{\frac{1}{\beta} \int_{-\beta/2}^{\beta/2} \mathcal{U} dt} \right) \right| \Phi \right\rangle} . \quad (3.45)$$

Parallelamente, la definizione di  $V_{var}$

$$V_{var} = \lim_{\beta \rightarrow \infty} \frac{1}{\beta} \frac{\int \mathcal{D}\psi \mathcal{D}\psi^\dagger e^{-\int L_E^0[\psi, \psi^\dagger] d\tau} \int dx_0 V(x_0)}{\int \mathcal{D}\psi \mathcal{D}\psi^\dagger e^{-\int L_E^0[\psi, \psi^\dagger] d\tau}} , \quad (3.46)$$

per un operatore  $V$  indipendente dal tempo si semplifica in

$$V_{var} = \lim_{\beta \rightarrow \infty} \frac{\int \mathcal{D}\psi \mathcal{D}\psi^\dagger V e^{-\int L_E^0[\psi, \psi^\dagger] d\tau}}{\int \mathcal{D}\psi \mathcal{D}\psi^\dagger e^{-\int L_E^0[\psi, \psi^\dagger] d\tau}} . \quad (3.47)$$

In generale  $L_E^0$  è data dal prolungamento nell'euclideo della lagrangiana  $L^0$  di azione

$$\begin{aligned} S = i \int d^4x \psi^\dagger(x) \psi(x) - \int d^4x d^4x' \psi^\dagger(x) \mathcal{E}(x, x') \psi(x') \\ - \int d^4x d^4x' \psi^\dagger(x) \psi^\dagger(x') \mathcal{W}(x, x') \psi(x') \psi(x) , \end{aligned} \quad (3.48)$$

dove  $\mathcal{E}$  e  $\mathcal{W}$  sono generici operatori, rispettivamente, a un corpo e a due corpi. Per un sistema invariante per traslazioni la lagrangiana (3.48) nello spazio dei momenti diventa quindi

$$L^0 = i \sum_q \dot{a}_q^\dagger a_q - \sum_q \epsilon_q a_q^\dagger a_q - \sum_{q,p,k} w_q a_p^\dagger a_k^\dagger a_{k-q} a_{p+q} . \quad (3.49)$$

Nel seguito, la lagrangiana euclidea verrà indicata sinteticamente come

$$L_E^0 = U + W , \quad (3.50)$$

dove il termine  $U$  include i contributi ad un corpo. Poiché le proprietà del sistema sono determinate essenzialmente dall'interazione a due corpi, il termine ad un corpo è ridotto alla forma più semplice possibile, ovvero all'energia di singola particella  $\epsilon_q$  definita con la funzione di Heaviside attrattiva al di sotto del livello di Fermi e repulsiva al di sopra

$$\epsilon_q = \Delta \Theta(q - k_F) - \Delta \Theta(k_F - q) . \quad (3.51)$$

La presenza del parametro  $\Delta$  ha lo scopo di individuare univocamente lo stato fondamentale della teoria, che altrimenti risulterebbe infinitamente degenere. Come si vedrà successivamente avere uno stato fondamentale unico è una condizione importante nel processo di limite a  $\beta \rightarrow \infty$ .

Il valore di aspettazione di  $V$  nell'Equazione (3.47) è stato trasformato in rapporto tra funzioni di Green degli operatori

$$V e^{\frac{1}{\beta} \int_{-\beta/2}^{\beta/2} U dt} , \quad e^{\frac{1}{\beta} \int_{-\beta/2}^{\beta/2} U dt} ,$$

in una teoria il cui stato di vuoto è rappresentato dallo stato fondamentale del gas libero di Fermi. Lo stato fondamentale della lagrangiana  $L_E^0$  coincide con lo stato fondamentale  $\Phi$  del gas libero di Fermi, la cui lagrangiana euclidea è

$$\mathcal{L}_E^0 = U . \quad (3.52)$$

L'operatore a due corpi  $W$ , infatti, genera gli stati eccitati, consentendo transizioni di coppie di particelle a stati al di fuori del mare di Fermi. Quindi, usando la relazione che lega integrali funzionali e funzioni di Green, l'Equazione (3.47) si può trasformare nel rapporto tra i valori di aspettazione nello stato  $\Phi$  del prodotto tempo ordinato degli operatori

$$V e^{-\int dt W} , \quad e^{-\int dt W} , \quad (3.53)$$

con peso dato dall'esponenziale della lagrangiana  $\mathcal{L}_E^0$ , il cui stato fondamentale è  $\Phi$

$$V_{var} = \frac{\mathcal{Z}_0 \langle \Phi | \mathcal{T} \left( V e^{-\int dt W} \right) | \Phi \rangle}{\mathcal{Z}_0 \langle \Phi | \mathcal{T} \left( e^{-\int dt W} \right) | \Phi \rangle}, \quad (3.54)$$

dove

$$\mathcal{Z}_0 = \int \mathcal{D}\psi \mathcal{D}\psi^\dagger e^{-\int dt \mathcal{L}_E^0[\psi, \psi^\dagger]}, \quad (3.55)$$

è la costante di normalizzazione della misura funzionale associata alla lagrangiana  $\mathcal{L}_E^0$

$$\frac{e^{-\int \mathcal{L}_E^0[\psi, \psi^\dagger]}}{\int \mathcal{D}\psi \mathcal{D}\psi^\dagger e^{-\int \mathcal{L}_E^0[\psi, \psi^\dagger]}}. \quad (3.56)$$

L'equivalenza dei due principi variazionali è garantita se la (3.45) e la (3.54) coincidono, ovvero se il potenziale a due corpi è legato al fattore di correlazione secondo alla relazione

$$W \equiv -\frac{1}{\beta} \mathcal{U}. \quad (3.57)$$

Poiché nella derivazione delle condizioni di equivalenza non è stata utilizzata alcuna informazione sulla forma e su proprietà di commutazione di  $V$ , come preannunciato nella sezione precedente la relazione (3.40) è valida anche per un qualsiasi operatore, incluso quello che descrive l'energia cinetica.

### 3.5 L'espansione perturbativa

La condizione (3.57), stabilisce l'equivalenza tra le due formulazioni variazionali e rappresenta il punto di transizione dalla teoria nota delle basi correlate alla formulazione nuova con gli integrali sui cammini. Avendo spostato il problema variazionale dalla funzione d'onda alla lagrangiana di prova, si può procedere con uno sviluppo perturbativo nel potenziale a due corpi  $W$  della quantità  $V_{var}$  (3.47).

Per ricollegare l'espansione perturbativa variazionale all'espansione FHNC è necessario eliminare la dipendenza dall'energia, e quindi dal tempo, che compare nelle funzioni di Green della teoria.

Partendo dalla lagrangiana  $L = U - W$ , il cui prolungamento euclideo definisce la funzione peso  $e^{-\int L_E^0[\psi, \psi^\dagger] d\tau}$ , si può definire il funzionale generatore delle funzioni di Green introducendo le sorgenti esterne  $\eta$  e  $\eta^\dagger$

$$Z[\eta, \eta^\dagger] = \int \mathcal{D}\psi \mathcal{D}\psi^\dagger e^{i \int dt (L(t) + \eta^\dagger(t)\psi(t) + \psi^\dagger(t)\eta(t))}. \quad (3.58)$$

Il valore di aspettazione del potenziale  $V$  definito dalla (3.38) si può ottenere dal funzionale generatore attraverso le derivate funzionali rispetto alle sorgenti

$$\begin{aligned} \langle V \rangle &= \frac{1}{Z_0} \\ &\times \int d^4x d^4y \left( \frac{i\delta}{\delta\eta(x)} \right) \left( \frac{i\delta}{\delta\eta(y)} \right) \mathcal{V}(x, y) \left( \frac{-i\delta}{\delta\eta^\dagger(y)} \right) \left( \frac{-i\delta}{\delta\eta^\dagger(x)} \right) Z[\eta, \eta^\dagger] \Big|_{\eta, \eta^\dagger=0}. \end{aligned} \quad (3.59)$$

Il funzionale generatore, a sua volta, può essere espanso perturbativamente nel potenziale a due corpi  $W$

$$\begin{aligned} Z[\eta, \eta^\dagger] & \quad (3.60) \\ & = \exp \left[ -i \int d^4x d^4y \left( \frac{i\delta}{\delta\eta(x)} \right) \left( \frac{i\delta}{\delta\eta(y)} \right) \mathcal{W}(x, y) \left( \frac{-i\delta}{\delta\eta^\dagger(y)} \right) \left( \frac{-i\delta}{\delta\eta^\dagger(x)} \right) \right] \mathcal{Z}_0[\eta, \eta^\dagger], \end{aligned}$$

rispetto a  $\mathcal{Z}_0[\eta, \eta^\dagger]$ , il funzionale generatore della teoria imperturbata. Ricordiamo che in questo caso la teoria imperturbata è descritta dalla lagrangiana  $\mathcal{L}^0 = U$ , con (cfr. equazione (3.51) )

$$U = i \sum_q \dot{a}_q^\dagger a_q - \sum_q [\Delta\Theta(q - k_F) - \Delta\Theta(k_F - q)] a_q^\dagger a_q, \quad (3.61)$$

che ha come stato fondamentale lo stato fondamentale del gas di Fermi. Indicheremo con  $G_\Delta^0$  la funzione di Green a due punti (propagatore) di questa teoria.

Imponendo le condizioni antiperiodiche al bordo richieste dalla natura fermionica dei campi e la discretizzazione delle frequenze, conseguenza della temperatura finita  $\beta$ , la funzione di Green nello spazio dei momenti e delle frequenze è data da

$$G_\Delta^0(\omega_n, k; \beta) = \frac{\Theta(k - k_F)}{\omega_n - \Delta + i\epsilon} + \frac{\Theta(k_F - k)}{\omega_n + \Delta - i\epsilon}. \quad (3.62)$$

La combinazione delle due condizioni, antiperiodicità al bordo e dominio di integrazione finito, porta ad avere frequenze discrete  $\omega_n = (2n + 1)\pi/\beta$ .

Dovendo calcolare, in realtà, il limite a temperatura nulla presente nella definizione di  $V_{var}$ , si può utilizzare direttamente la il propagatore del gas libero di Fermi a temperatura nulla. Nello spazio delle coordinate spazio-temporali troviamo

$$\begin{aligned} iG_\Delta^0(x, y) & = \langle \Phi | T [\psi(x), \psi^\dagger(y)] | \Phi \rangle = e^{-i\Delta|x_0 - y_0|} \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{x} - \mathbf{y})} \quad (3.63) \\ & \times [\Theta(x_0 - y_0)\Theta(k - k_F) - \Theta(y_0 - x_0)\Theta(k_F - k)], \end{aligned}$$

la cui trasformata di Fourier coincide con il limite  $\beta \rightarrow \infty$  della (3.62).

Dallo sviluppo perturbativo del funzionale generatore si può ricavare l'espansione in diagrammi di Feynman di  $\langle V \rangle$  ricorrendo alle derivate funzionali rispetto alle sorgenti esterne.

$$\begin{aligned} \langle V \rangle & = \int d^4x d^4y \left( \frac{i\delta}{\delta\eta(x)} \right) \left( \frac{i\delta}{\delta\eta(y)} \right) \mathcal{V}(x, y) \left( \frac{-i\delta}{\delta\eta^\dagger(y)} \right) \left( \frac{-i\delta}{\delta\eta^\dagger(x)} \right) \quad (3.64) \\ & \times \sum_{k=0} \frac{(-i)^k}{k!} \left\{ \int d^4x_1 d^4x_2 \left( \frac{i\delta}{\delta\eta(x_1)} \right) \left( \frac{i\delta}{\delta\eta(x_2)} \right) \mathcal{W}(x_1, x_2) \left( \frac{-i\delta}{\delta\eta^\dagger(x_2)} \right) \left( \frac{-i\delta}{\delta\eta^\dagger(x_1)} \right) \right\}^k \\ & \times e^{-i \int dz dw \eta^\dagger(w) G_\Delta^{(0)}(w, z) \eta(z)}. \end{aligned}$$

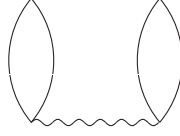
Il limite  $\beta \rightarrow \infty$  dell'espressione (3.64) divisa per il periodo  $\beta$

$$V_{var} = \lim_{\beta \rightarrow \infty} \frac{1}{\beta} \langle V \rangle, \quad (3.65)$$

è lo sviluppo cercato per  $V_{var}$ . I diagrammi di Feynman che si ottengono, in cui rientrano i propagatori (3.63) sono da confrontare con i diagrammi di Goldstone del metodo perturbativo *standard*.

### 3.6 I diagrammi intermedi e le integrazioni temporali

Il termine del primo ordine nel potenziale a due corpi  $W$  corrisponde al diagramma di Feynman riportato in Fig. 3.1, dove la linea tratteggiata indica l'interazione  $W$ , la



**Figura 3.1.** Il diagramma di Feynman del primo ordine in  $W$  dell'espansione perturbativa.

linea ondulata il termine  $V$  e le linee continue sono associate ai propagatori liberi  $G^0$ . Con semplici trasformazioni, questi ultimi possono essere separati in due contributi

$$G_{\Delta}^0(x, y) = \mathcal{K}_{\Delta}^0(x, y) + \mathcal{G}_{\Delta}^0(x, y) , \quad (3.66a)$$

il primo dei quali contiene la funzione di Heaviside sulle variabili temporali

$$\mathcal{K}_{\Delta}^0(x, y) = e^{-i\Delta|x_0-y_0|} \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \Theta(x_0 - y_0) e^{-i\mathbf{k}(\mathbf{x}-\mathbf{y})} , \quad (3.66b)$$

e si riduce alla forma

$$\mathcal{K}_{\Delta}^0(x, y) = e^{-i\Delta|x_0-y_0|} \Theta(x_0 - y_0) \delta(\mathbf{x} - \mathbf{y}) , \quad (3.66c)$$

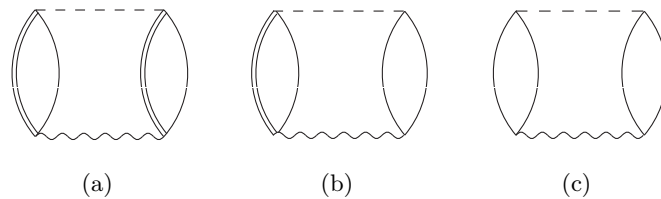
mentre l'altro contiene la  $\Theta$  sugli impulsi

$$\mathcal{G}_{\Delta}^0(x, y) = -e^{-i\Delta|x_0-y_0|} \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \Theta(\mathbf{k}_F - \mathbf{k}) e^{-i\mathbf{k}(\mathbf{x}-\mathbf{y})} , \quad (3.66d)$$

e si può esprimere tramite la matrice densità, ovvero attraverso la funzione di Slater (F.6)

$$\mathcal{G}_{\Delta}^{(0)}(x, y; \beta) = -e^{-i\Delta|x_0-y_0|} \rho(\mathbf{x} - \mathbf{y}) . \quad (3.66e)$$

Se si associano alle (3.66c) due nuovi elementi grafici, rispettivamente una doppia linea per la funzione  $\mathcal{K}$  e una linea continua alla funzione  $\mathcal{G}$ , il diagramma della Fig 3.1 si scompone in tre nuovi diagrammi



**Figura 3.2.** I nuovi diagrammi intermedi con le linee  $\mathcal{K}$  (linee doppie) e  $\mathcal{G}$  (linee singole).

Riottenere la teoria FHNC vuol dire sommare il contributo di tutti questi diagrammi intermedi. L'obiettivo è eseguire la somma in modo da eliminare la dipendenza dal tempo degli integrandi, contentua unicamente nelle funzioni di Green<sup>2</sup>, prima di eseguire le integrazioni temporali. Se si riuscisse a rimuovere la dipendenza dal tempo lungo una qualsiasi linea fermionica, infatti, si potrebbe dimostrare che tutti i diagrammi intermedi possono essere sommati e sono completamente indipendenti dal tempo.

### 3.6.1 Il caso $\Delta = 0$

Nel caso  $\Delta = 0$  la dipendenza dal tempo è determinata unicamente dalle funzioni  $\Theta$  che compaiono nelle linee  $\mathcal{K}$ . La rimozione della dipendenza dal tempo è garantita dalla presenza di tutti i possibili ordinamenti temporali delle funzioni di Green lungo le linee fermioniche, e può essere dimostrata facilmente prendendo in considerazione una linea  $\mathcal{K}$  tra gli istanti  $t_1$  e  $t_2$  seguita da due linee  $\mathcal{G}$  che la collegano agli istanti  $t_3$  e  $t_4$  nei due possibili modi illustrati nella Fig.3.3.

Le linee corrispondono rispettivamente alla quantità (per semplificare la notazione scriviamo  $\delta(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j) = \delta(ij)$  e  $\rho(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j) = \rho(ij)$ )

$$\Theta(t_2 - t_1)e^{-i\Delta|t_2-t_1|}\delta(21)e^{-i\Delta|t_3-t_1|}\rho(13)e^{-i\Delta|t_4-t_2|}\rho(42) , \quad (3.67a)$$

$$\Theta(t_1 - t_2)e^{-i\Delta|t_2-t_1|}\delta(12)e^{-i\Delta|t_2-t_3|}\rho(23)e^{-i\Delta|t_4-t_1|}\rho(41) , \quad (3.67b)$$

e la somma dei due contributi, grazie alla funzione  $\delta(21)$ , risulta completamente fattorizzabile in una parte spaziale comune a entrambe le linee e una parte dipendente dal tempo

$$\delta(21)\rho(13)\rho(14)e^{-i\Delta|t_2-t_1|} \left[ \Theta(t_2 - t_1)e^{-i\Delta|t_3-t_1|}e^{-i\Delta|t_4-t_2|} + \Theta(t_1 - t_2)e^{-i\Delta|t_2-t_3|}e^{-i\Delta|t_4-t_1|} \right] , \quad (3.67c)$$

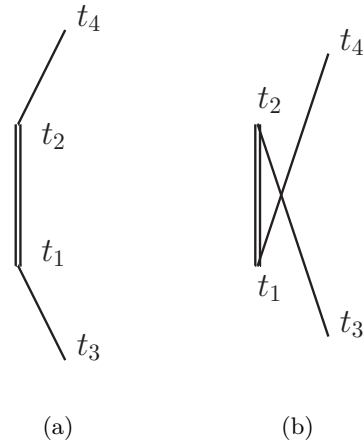
che dipende dall'ordinamento temporale scelto. Per  $\Delta = 0$  la parte temporale si riduce semplicemente alla somma delle funzioni  $\Theta$ , il cui contributo è pari a uno.

Un procedimento analogo può essere ripetuto per ricostruire linee fermioniche con linee  $\mathcal{K}$  tra diverse linee di interazione e collegate con due linee  $\mathcal{G}$  agli istanti iniziali e finali  $t_3$  e  $t_4$ . Le linee  $\mathcal{G}$  possono essere poi chiuse per formare un loop. I diagrammi chiusi, infatti, devono contenere almeno una linea singola  $\mathcal{G}$  per avere un contributo diverso da zero. Si ottengono in questo modo diagrammi chiusi indipendenti dal tempo e si dimostra che ogni diagramma chiuso non può avere dipendenza da  $t$ . L'integrazione temporale di questi diagrammi si traduce in un termine  $\beta^n$ , con  $n$  pari al numero di linee di interazione, che si semplifica con il denominatore di ciascuna linea  $\mathcal{W} = -\mathcal{U}/\beta$  o con il denominatore  $1/\beta$  che accompagna ciascuna delle linee  $\mathcal{V}$ .

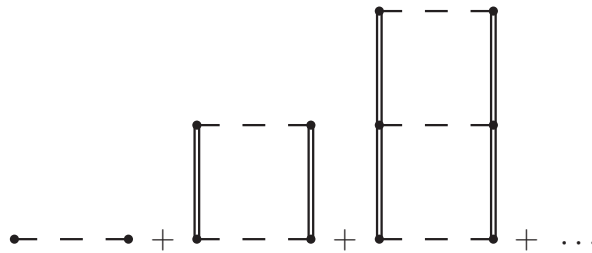
### 3.6.2 I diagrammi *ladder*

Selezionare i diagrammi da sommare per eliminare la dipendenza dal tempo non sempre è una operazione semplice. È ragionevole immaginare, infatti, che alcuni di questi diagrammi coincidano, ovvero che i diagrammi ottenuti con permutazioni degli indici temporali non corrispondano a diagrammi di Feynman differenti. È il caso, ad esempio, dei diagrammi *ladder* riportati in Fig. 3.4

<sup>2</sup>Ricordiamo che stiamo descrivendo una teoria con potenziali indipendenti dal tempo.



**Figura 3.3.** La somma su tutti i possibili ordinamenti temporali determina la cancellazione della dipendenza temporale di una linea fermionica.



**Figura 3.4.** La somma dei diagrammi ladder corrisponde ad un contributo totale pari a  $e^{\mathcal{U}(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2)} - 1$  (3.68) e dimostra l'equivalenza con il fattore di correlazione BDJ.



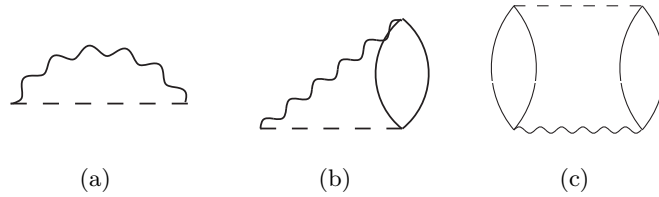
Sommare questi contributi nel modo corretto vuol dire considerare il fattore di simmetria  $1/n!$  con  $n$  pari all'ordine del diagramma. Il prodotto di  $n$  di linee  $\mathcal{K}$  tra linee di interazione  $\mathcal{U}/\beta$ , inoltre, contiene delta di Dirac spaziali che consentono di scrivere il termine di ordine  $n$  semplicemente come potenza  $n$ -esima del potenziale di interazione. La formula finale per la somma dei diagrammi *ladder* è che si ottiene è

$$\sum_{n=1} \frac{1}{n!} \mathcal{U}^n(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2) = e^{\mathcal{U}(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2)} - 1, \quad (3.68)$$

e dimostra il legame tra il potenziale di prova a due corpi e il fattore di correlazione  $f^2(ij)$  che nell'espansione FHNC è la funzione variazionale

$$e^{\mathcal{U}(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2)} - 1 = f^2(r_{12}) - 1. \quad (3.69)$$

L'ultima trasformazione che resta da fare è utilizzare la località delle linee  $\mathcal{K}$  e contrarre il prodotto in successione delle funzioni  $\delta$  in un singolo punto, sostituendo ad ogni linea di interazione la somma  $e^{\mathcal{U}} - 1$  dei diagrammi *ladder*. Nel processo di contrazione può succedere che si arrivi ad un diagramma in cui due punti siano collegati da due diverse linee di interazione, come in Fig. 3.5.



**Figura 3.5.** Le contrazioni delle linee  $\mathcal{K}$  in punti nei diagrammi intermedi.

A questo punto ci sono tutti gli elementi per giustificare l'equivalenza da un punto di vista topologico. Si ottiene, infatti, una espansione in potenze della densità  $\rho$  con diagrammi chiusi in cui ogni punto ha una funzione di Slater  $\ell$  entrante e una uscente. Le linee di interazione sono esprimibili in funzione del parametro variazionale  $f^2(ij)$  secondo la relazione (3.69). Resta da discutere il fattore di degenerazione, fin qui omissso. Tener conto degli stati di spin-isospin vuol dire introdurre le componenti  $i$  e  $j$  sui campi fermionici e considerare anche le variabili discrete delle funzioni di Green.

Le linee  $\mathcal{K}$  e  $\mathcal{G}$  risultano diagonali negli indici associati ai gradi di libertà discreti. Le successioni di linee  $\mathcal{K}$  avranno in più un prodotto di delta di Kronecker sugli stati di spin che si contraggono insieme alle delta di Dirac. La somma finale sugli stati di spin si esegue esattamente come nell'espansione FHNC, trattando in tutti e due i casi diagrammi chiusi.

Questa ultima precisazione chiude la dimostrazione dell'equivalenza tra le due formulazioni variazionali nel caso di sistemi correlati trattabili con la teoria delle basi correlate. Nel caso  $\Delta = 0$  il metodo variazionale con gli integrali sui cammini consente di ottenere tutti i diagrammi derivabili in approssimazione FHNC, indipendentemente dalla forma del potenziale  $V$ . Si potrebbe, infatti, considerare una linea di interazione  $W$  o  $V$  dipendente dal tempo, senza mettere in crisi la dimostrazione dell'indipendenza dal tempo della linea fermionica. Integrare nel

tempo un diagramma di ordine  $n$  significherebbe trovare un valor medio delle  $n$  linee di potenziale. Se nel caso  $\Delta = 0$  questa modifica non cambia le proprietà del sistema, può essere interessante nel caso di calcoli dell'energia dello stato fondamentale di teorie effettive con hamiltoniane dipendenti dall'energia.

La descrizione di sistemi di molte particelle in interazione tramite potenziali caratterizzati da un *core* fortemente repulsivo non è possibile nell'ambito dell'ordinaria teoria delle perturbazioni. Corrispondono a questa caratteristica diversi sistemi tra cui la materia nucleare e, soprattutto, i liquidi, sia classici che quantistici ( $^3\text{He}$  fermionico e  $^4\text{He}$  bosonico).

Si sono sviluppate vie alternative per la soluzione del problema a molti corpi. Da una parte l'approccio perturbativo può essere modificato sostituendo la matrice di reazione  $G$  al potenziale dell'interazione nuda, sulla quale la teoria delle perturbazioni standard definisce l'espansione perturbativa. La matrice di reazione, invece, tiene conto dell'interazione rinormalizzata e corrisponde alla reale interazione fisica tra le particelle, necessariamente non divergente. Avendo a disposizione una interazione ben definita, si può ripristinare l'espansione perturbativa per ottenere le proprietà del sistema.

D'altra parte, notevole successo hanno avuto anche le tecniche variazionali e la descrizione dei sistemi a molte particelle in termini di funzioni d'onda correlate. In questo approccio il potenziale di interazione svolge un ruolo chiave nella determinazione degli stati del sistema, intervenendo direttamente sulle funzioni d'onda. La forma della funzione di correlazione ottimale viene stabilita ricorrendo ad un principio variazionale, richiedendo che la funzione d'onda correlata che minimizza l'energia fornisca un limite superiore all'energia dello stato fondamentale del sistema. Il vantaggio di una descrizione con le funzioni d'onda correlate nasce dalla possibilità di considerare interazioni dipendenti dagli stati discreti del sistema. A differenza dei liquidi quantistici, la materia nucleare infatti presenta delle forti correlazioni determinate dagli stati di spin e isospin delle particelle, di cui non si può non tener conto.

Le due strade, diverse nell'approccio e nei metodi, convergono tuttavia ad una descrizione comune delle proprietà dei sistemi fortemente correlati. Concettualmente questo accordo sui risultati lascia presupporre la possibilità di una formulazione unica, equivalente alle due metodologie fin qui sviluppate parallelamente. Un punto di incontro tra i due metodi potrebbe essere la descrizione con gli integrali sui cammini di Feynman insieme alla formulazione di un principio variazionale per sistemi fortemente correlati che sia in grado di riprodurre i risultati ottenuti con il metodo delle basi correlate. Questo approccio alternativo sposta l'oggetto del calcolo

---

variazionale dalla funzione d'onda della teoria CBF all'hamiltoniana che definisce la misura funzionale dei *path integrals*. Il primo vantaggio di una formulazione del genere è la possibilità di trattare sistemi per i quali non si può definire una funzione d'onda, inevitabilmente esclusi dalla descrizione variazionale ordinaria. Determinata per via variazionale la forma dell'hamiltoniana, libera di variare in uno spazio più ampio delle hamiltoniane di sistemi fisici reali, si può pensare di migliorare la stima dell'energia per via perturbativa. La formulazione con gli integrali sui cammini, infatti, consente di definire i diagrammi di Feynman in termini dei quali lo sviuppo perturbativo di qualsiasi teoria risulta particolarmente compatto.

La connessione tra il nuovo metodo variazionale e la teoria delle basi correlate è stata stabilita per sistemi descritti nel vecchio formalismo dall'*ansatz* BDJ in condizioni di interazioni indipendenti dal tempo. Determinata la misura funzionale, la teoria delle perturbazioni riesce a ottenere tutti i diagrammi necessari all'espansione FHNC. La possibilità di includere sistemi più complicati rende questo metodo interessante per descrivere interazioni dipendenti dallo spin e potrebbe rappresentare una alternativa alle limitazioni attuali legate all'approssimazione SOC (*single-operator chain*) con cui questi sistemi sono descritti fino ad ora.

---

Descrizione dello stato fondamentale del gas di Fermi

---

### A.1 Determinante di Slater

La forma esplicita del determinante di Slater è

$$\Phi(x_1, \dots, x_N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_P (-1)^P \prod_{i=1}^N \varphi_{\alpha_i}(x_i), \quad (\text{A.1})$$

dove P indica tutte le possibili permutazioni di N oggetti e  $(-1)^P$  è +1 per permutazioni pari e -1 per permutazioni dispari.

Usando la definizione del determinante con il tensore di Levi-Civita

$$\Phi(x_1, \dots, x_N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \left[ \frac{1}{N!} \epsilon_{i_1 \dots i_N} \epsilon_{j_1 \dots j_N} \varphi_{i_1}(x_{j_1}) \dots \varphi_{i_N}(x_{j_N}) \right], \quad (\text{A.2})$$

si può scrivere

$$\begin{aligned} |\Phi(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N)|^2 &= \frac{1}{N!} \left[ \frac{1}{N!} \epsilon_{i_1 \dots i_N} \epsilon_{j_1 \dots j_N} \varphi_{i_1}(x_{j_1}) \dots \varphi_{i_N}(x_{j_N}) \right] \\ &\quad \times \left[ \frac{1}{N!} \epsilon_{k_1 \dots k_N} \epsilon_{\ell_1 \dots \ell_N} \varphi_{k_1}^*(x_{\ell_1}) \dots \varphi_{k_N}^*(x_{\ell_N}) \right] \\ &= \left( \frac{1}{N!} \right)^3 \epsilon_{i_1 \dots i_N} \epsilon_{j_1 \dots j_N} \epsilon_{k_1 \dots k_N} \epsilon_{\ell_1 \dots \ell_N} \\ &\quad \times [\varphi_{i_1}(x_{j_1}) \varphi_{k_1}^*(x_{\ell_1})] \dots [\varphi_{i_N}(x_{j_N}) \varphi_{k_N}^*(x_{\ell_N})]. \end{aligned}$$

La proprietà

$$\epsilon_{i_1 \dots i_N} \epsilon_{k_1 \dots k_N} = \det \begin{pmatrix} \delta_{i_1 k_1} & \dots & \delta_{i_1 k_N} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \delta_{i_N k_1} & \dots & \delta_{i_N k_N} \end{pmatrix}, \quad (\text{A.3})$$

implica che il secondo membro della (A.3) è una somma su tutte le configurazioni  $\{k_1 \dots k_N\} \in \{F\}$ , dove  $\{F\}$  indica il mare di Fermi, di termini del tipo

$$[\varphi_{k_1}(x_{j_1}) \varphi_{k_1}^*(x_{\ell_1})] \dots [\varphi_{k_N}(x_{j_N}) \varphi_{k_N}^*(x_{\ell_N})]. \quad (\text{A.4})$$

Per ognuna delle  $N!$  configurazioni  $\{k_1 \dots k_N\}$  ci sono  $N!$  configurazioni delle  $j$  e quindi, in totale, la somma ha  $N!^2$  termini uguali. Il risultato finale è quindi

$$\epsilon_{j_1 \dots j_N} \epsilon_{\ell_1 \dots \ell_N} [\varphi_\alpha(x_{j_1}) \varphi_\alpha^*(x_{\ell_1})] \dots [\varphi_\alpha(x_{j_N}) \varphi_\alpha^*(x_{\ell_N})] = \det |\rho(x_j, x_\ell)| \quad , \quad (\text{A.5})$$

che implica

$$\begin{aligned} |\Phi(x_1, \dots, x_N)|^2 &= \frac{1}{N!} \Delta_N(x_1, \dots, x_N) \\ &= \frac{1}{N!} \det |\rho(x_i, x_j)| \quad (i, j = 1, \dots, N) . \end{aligned} \quad (\text{A.6})$$

## A.2 Matrice densità

La (A.6) è una proprietà generale del prodotto di determinanti di matrici, che può essere riscritto come determinante della matrice prodotto. In questo caso, La matrice in questione è la matrice densità del sistema di fermioni liberi

$$\rho(x_i, x_j) = \sum_{\alpha \in F} \varphi_\alpha^*(x_i) \varphi_\alpha(x_j) . \quad (\text{1.16})$$

Una volta identificato il modulo quadro della funzione di prova con il determinante della matrice densità e definita la funzione  $\Delta_N$

$$\Delta_N(x_1 \dots x_N) = N! |\Phi(x_1, \dots, x_N)|^2 \quad , \quad (\text{A.7})$$

si possono definire in modo analogo le funzioni  $\Delta_q$ , determinanti dei minori di ordine  $q$  della matrice  $N \times N$  di elementi  $\rho(x_i, x_j)$

$$\begin{aligned} \Delta_q(x_1, \dots, x_q) &= \frac{N!}{(N-q)!} \int dx_{q+1} \dots dx_N |\Phi|^2 \\ &= \frac{1}{(N-q)!} \int dx_{q+1} \dots dx_N \Delta_N(x_1, \dots, x_N) . \end{aligned} \quad (\text{A.8})$$

La definizione delle funzioni  $\Delta_q$  si può estendere a valori di  $q$  infiniti, imponendo la condizione  $\Delta_q \equiv 0$  per  $q > N$ . In generale, le funzioni  $\Delta_q$  corrispondono alle distribuzioni di probabilità di  $q$  particelle del gas di Fermi.

Il modulo quadro dello stato libero interviene negli integrali di cluster insieme al fattore di correlazione che definisce la funzione d'onda dello stato correlato. Avendo in mente una funzione di prova alla Jastrow e un sistema invariante per traslazioni, con un funzione modello costruita con onde piane, si può effettuare analiticamente la somma sugli stati del mare di Fermi, ricavando una forma esplicita per la matrice densità spaziale da utilizzare negli integrali di cluster

$$\rho(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j) = \sum_{\sigma_i, \sigma_j} \rho(x_i, x_j) = \frac{\nu}{(2\pi)^3} \int_{|\mathbf{k}| \leq k_F} d^3k e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} = \rho \ell(k_F |\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|) \quad , \quad (\text{A.9})$$

dove  $\ell(y)$  è la funzione di Slater

$$\ell(y) = \frac{3}{y^3} (\sin y - y \cos y) \quad , \quad (\text{A.10})$$

e  $\rho = N/\Omega$  è la densità spaziale di particelle, somma sugli spin della distribuzione a una particella o, equivalentemente, traccia sui gradi di libertà discreti degli elementi diagonali della matrice densità di densità  $\rho = \nu\rho(i, i)$ .

Consideriamo, per esempio, la distribuzione di probabilità di trovare due particelle nelle posizioni  $\mathbf{r}_1$  e  $\mathbf{r}_2$  nello stato fondamentale del gas di Fermi, che si può scrivere nella forma

$$\begin{aligned} p^{(2)}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) &= \rho^2 N(N-1) \sum_{\sigma_1, \sigma_2} \int dx_3 \dots dx_N |\Phi(x_1, \dots, x_N)|^2 \\ &= \rho^2 g_{FG}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2), \end{aligned} \quad (\text{A.11})$$

dove la funzione di distribuzione radiale  $g_{FG}$ , che descrive l'effetto delle correlazioni statistiche, è data dalla

$$g_{FG}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \frac{1}{\rho^2} \Delta_2(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2), \quad (\text{A.12})$$

con

$$\begin{aligned} \Delta_2(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) &= \text{Tr}\{\Delta_2(x_1, x_2)\} = \sum_{\sigma_1, \sigma_2} \{\rho(1, 1)\rho(2, 2) - \rho(12)\rho(12)\} \\ &= \rho^2 \left[ 1 - \frac{1}{\nu} \ell^2(k_F |\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|) \right]. \end{aligned} \quad (\text{A.13})$$

Dalle equazioni precedenti si ricava facilmente

$$g_{FG}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = g_{FG}(r_{12}) = 1 - \frac{1}{\nu} \ell^2(k_F r). \quad (\text{A.14})$$

Le funzioni di distribuzione di ordine superiore diventano, a loro volta, combinazioni più complicate di funzioni di Slater. In generale le funzioni di distribuzione spaziale a  $q$  particelle del sistema libero si possono ottenere come somma sugli stati di spin  $\sigma_1 \dots \sigma_q$  dei minori di ordine  $q$  della matrice  $N \times N$  di elementi  $\rho(x_i, x_j)$

$$\Delta_q(\mathbf{r}_1 \dots \mathbf{r}_q) = \sum_{\sigma_1 \dots \sigma_q} \det |\rho(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j)| \quad (i, j = 1 \dots q). \quad (\text{A.15})$$

Per il gas di fermi troviamo quindi l'espressione

$$\Delta_q = \rho^q \sum_{\sigma_1 \dots \sigma_q} \begin{pmatrix} 1 & -\frac{1}{\nu} \ell(r_{12}) \delta_{\sigma_1, \sigma_2} & \dots & -\frac{1}{\nu} \ell(r_{1q}) \delta_{\sigma_1, \sigma_q} \\ -\frac{1}{\nu} \ell(r_{21}) \delta_{\sigma_2, \sigma_1} & 1 & \ddots & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots \\ -\frac{1}{\nu} \ell(r_{q1}) \delta_{\sigma_q, \sigma_1} & \dots & \dots & 1 \end{pmatrix}, \quad (\text{A.16})$$

che per  $q = 3$  diventa (Fig. A.1)

$$\begin{aligned} g_{FG}^{(3)}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3) &= 1 - \frac{1}{\nu} \ell^2(k_F r_{12}) - \frac{1}{\nu} \ell^2(k_F r_{13}) - \frac{1}{\nu} \ell^2(k_F r_{23}) \\ &\quad + \frac{1}{\nu^2} \ell(k_F r_{12}) \ell(k_F r_{23}) \ell(k_F r_{31}) \\ &\quad + \frac{1}{\nu^2} \ell(k_F r_{13}) \ell(k_F r_{32}) \ell(k_F r_{21}). \end{aligned} \quad (\text{A.17})$$

$$\begin{aligned}
g_{FG}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) &= \begin{array}{c} 1 \\ \circ \end{array} \begin{array}{c} 2 \\ \circ \end{array} + \begin{array}{c} 1 \quad 2 \\ \circ \quad \circ \\ \curvearrowright \end{array} \\
g_{FG}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3) &= \begin{array}{c} 3 \\ \circ \end{array} \begin{array}{c} 1 \\ \circ \end{array} \begin{array}{c} 2 \\ \circ \end{array} + \begin{array}{c} 3 \\ \circ \end{array} \begin{array}{c} 1 \quad 2 \\ \circ \quad \circ \\ \curvearrowright \end{array} + \begin{array}{c} 3 \\ \circ \end{array} \begin{array}{c} 1 \quad 2 \\ \circ \quad \circ \\ \curvearrowright \end{array} \begin{array}{c} \circ \\ 3 \end{array} \\
&+ \begin{array}{c} 3 \\ \circ \end{array} \begin{array}{c} 1 \quad 2 \\ \circ \quad \circ \\ \curvearrowright \end{array} \begin{array}{c} \circ \\ 3 \end{array} + \begin{array}{c} 3 \\ \circ \end{array} \begin{array}{c} 1 \quad 2 \\ \circ \quad \circ \\ \curvearrowright \end{array} \begin{array}{c} \circ \\ 3 \end{array}
\end{aligned}$$

**Figura A.1.** Rappresentazione diagrammatica della funzione di distribuzione radiale del gas libero di Fermi a due e tre particelle.

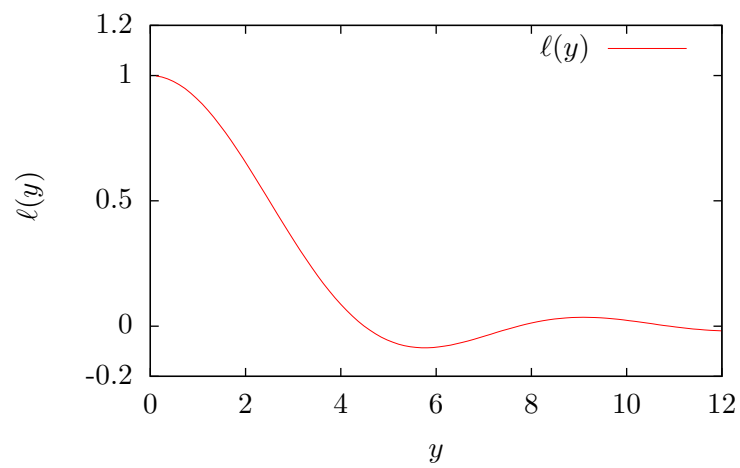
In Fig. A.2 è riportata la funzione di Slater (A.10), mentre le (A.18) descrivono alcune proprietà utili nel calcolo esplicito degli integrali di cluster: la convoluzione (A.18a), l'intergrale spaziale di  $\ell(r)$  e  $\ell^2(r)$  (A.18b) e la trasformata di Fourier (A.18c)

$$\int d\mathbf{r}_2 \ell(k_F r_{12}) \ell(k_F r_{23}) = \frac{\nu}{\rho} \ell(k_F r_{13}) \quad (\text{A.18a})$$

$$\int d\mathbf{r} \ell(k_F r) = \int d\mathbf{r} \ell^2(k_F r) = \frac{\nu}{\rho} \quad (\text{A.18b})$$

$$\frac{\rho}{\nu} \int d\mathbf{q} \ell(k_F r) e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} = \Theta(k_F - q). \quad (\text{A.18c})$$





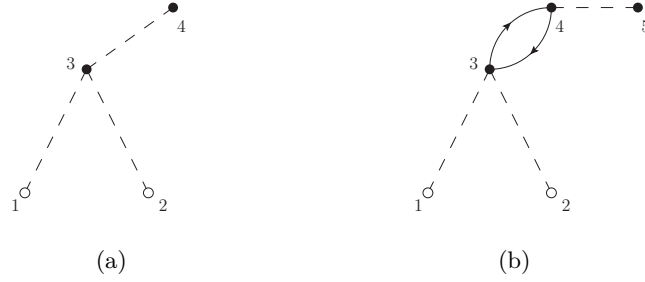
**Figura A.2.** La funzione di Slater definita nell'Eq. (A.10).

---

Espansione irriducibile

---

La cancellazione dei diagrammi riducibili è una conseguenza dell'invarianza per traslazioni del sistema. È semplice dimostrarlo per sistemi fermionici, ad esempio con un calcolo diretto del contributo alla funzione radiale dei diagrammi in Fig. B.1 per interazioni indipendenti dagli stati di spin e isospin.



**Figura B.1.** Un esempio di cancellazione dei diagrammi riducibili.

Dall'invarianza per traslazioni segue che le funzioni di correlazione  $h(r_{ij})$  dipendono soltanto dalla distanza relativa tra le particelle  $i$  e  $j$   $r_{ij} = |\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|$  e il contributo dei diagrammi in Fig. B.1(a) e Fig. B.1(b) può essere tradotto in termini analitici rispettivamente secondo le (B.1a) e (B.1b)

$$\rho^2 \int dr_3 dr_4 h(r_{13}) h(r_{32}) h(r_{34}), \quad (\text{B.1a})$$

$$\rho^3 \int dr_3 dr_4 dr_5 h(r_{13}) h(r_{32}) h(r_{45}) \left[ -\frac{1}{\nu} \ell(r_{34}) \ell(r_{43}) \right]. \quad (\text{B.1b})$$

Con una trasformazione di variabili nelle distanze relative tra le coppie di punti 3 – 4 e 5 – 4

$$r_5 - r_4 = r \quad \text{e} \quad r_4 - r_3 = r',$$

l'Equazione (B.1b) si trasforma in

$$\rho^3 \int dr_3 dr dr' h(r_{13}) h(r_{32}) h(r') \left[ -\frac{1}{\nu} \ell^2(r) \right], \quad (\text{B.2})$$

dove il contributo del termine  $\int dr' \left[ -\frac{1}{\nu} \ell^2(r) \right]$ , grazie alla proprietà (A.18b) della funzione di Slater, è semplicemente un fattore  $-1/\rho$ . Il resto dell'integrale ha esattamente la stessa struttura della (B.1a), pertanto i due contributi risultano uguali e opposti.

Questo tipo di analisi può essere condotta per qualsiasi punto di articolazione e giustifica l'espansione in diagrammi irriducibili discussa nel Capitolo 1. È opportuno sottolineare che l'irriducibilità dell'espansione diagrammatica è una proprietà generale valida per tutti i sistemi fermionici, sebbene la dimostrazione non sia altrettanto semplice nel caso di interazioni dipendenti dallo spin [7]. Meccanismi di cancellazione di diagrammi riducibili riguardano anche sistemi bosonici a meno di termini di ordine  $1/N$ , il cui contributo si annulla nel limite termodinamico.

---

Approssimanti e integrali di cluster

---

La schema di scomposizione degli integrali di cluster adottato nel Capitolo 1 è una delle possibili scelte di approssimazione. In generale, poiché nel limite di particelle indipendenti l'approssimante  $I_{ij}$  si riduce a prodotto dei singoli approssimanti  $I_{ij} \rightarrow I_i I_j$ , è possibile introdurre delle quantità correttive  $X_{ij}$  e  $Y_{ij}$  e scrivere

$$I_{ij} = I_i I_j + X_{ij} , \quad (\text{C.1a})$$

$$I_{ij} = I_i I_j Y_{ij} . \quad (\text{C.1b})$$

Le (C.1a) definiscono uno schema di approssimazione additivo in cui ogni approssimante è ottenuto come somma di prodotti di cluster  $X$

$$\begin{aligned} I_i(\beta) &= X_i \\ I_{ij}(\beta) &= X_i X_j + X_{ij} = I_i I_j (1 + x_{ij}) \\ I_{ijk}(\beta) &= X_i X_j X_k + X_i X_{jk} + X_j X_{ik} + X_k X_{ij} + X_{ijk} \\ &\vdots \\ I_{1\dots N}(\beta) &= \sum_{\substack{\text{tutte le partizioni} \\ n+\dots+m=N}} X_{i_1\dots i_n} \cdots X_{j_1\dots j_m} . \end{aligned} \quad (\text{C.2})$$

Le (C.1b), a loro volta, definiscono lo schema moltiplicativo adottato nel Capitolo 1. Seguendo la trattazione [12], il collegamento tra i due è dato dalle relazioni

$$\begin{aligned} Y_{ij} &= 1 + x_{ij} \\ Y_{ijk} &= \frac{1 + x_{ij} + x_{jk} + x_{ik} + x_{ijk}}{(1 + x_{ij})(1 + x_{jk})(1 + x_{ik})} \\ &\vdots \end{aligned} \quad (\text{C.3})$$

in cui compaiono i cluster normalizzati

$$x_{i_1\dots i_n} = \frac{X_{i_1\dots i_n}}{X_1 \cdots X_n} ,$$

di dimensioni  $O(N^{1-n})$ . Se si sostituiscono le relazioni (C.3) nell'equazione per il funzionale generatore

$$G(\beta) = \ln I(\beta) = \sum_i \ln Y_i + \sum_{i<j} Y_{ij} + \dots \quad (\text{C.4})$$

e si sviluppa in serie di potenze di  $1/N$  tenendo i contributi dominanti, si ottiene l'espansione (LINKED) in cluster del funzionale generatore

$$G(\beta) = (\Delta G)_2 + (\Delta G)_3 + \dots$$

con

$$\begin{aligned} (\Delta G)_2 &= \sum_{ij} \frac{1}{2} x_{ij} , \\ (\Delta G)_3 &= \sum_{ijk} \frac{1}{3!} x_{ijk} - \frac{1}{2} x_{ij} x_{jk} . \end{aligned} \quad (\text{C.5})$$

Questa espressione è particolarmente utile per il limite termodinamico, dal momento che contiene termini di ordine  $N$  e definisce un valore di aspettazione dell'energia con la dipendenza corretta da  $N$ , lineare essendo l'energia è una quantità estensiva. Per risalire ai clusters normalizzati si devono scrivere esplicitamente gli integrali di normalizzazione. Si introducono poi gli operatori  $h_{ij}$  e potenziali effettivi  $w_{ij}$  a molti corpi.

$$\begin{aligned} h_{ij} &= \langle ij | F^\dagger(12) F(12) - 1 | ij \rangle_a , \\ w_{ij} &= \langle ij | \frac{1}{2} F^\dagger(12) [t(1) + t(2), F(12)] + c.c + F^\dagger(12) v(12) F(12) | ij \rangle_a , \end{aligned} \quad (\text{C.6})$$

definiti a partire dai clusters e loro derivate in  $\beta = 0$

$$x_{ij}|_{\beta=0} \equiv h_{ij} , \quad x_{ijk}|_{\beta=0} \equiv h_{ijl} , \quad (\text{C.7a})$$

$$\left. \frac{\partial x_{ij}}{\partial \beta} \right|_{\beta=0} \equiv w_{ij} , \quad \left. \frac{\partial x_{ijk}}{\partial \beta} \right|_{\beta=0} \equiv w_{ijk} . \quad (\text{C.7b})$$

Con queste definizioni I primi termini dello sviluppo in serie del valore di aspettazione dell'energia diventano

$$\begin{aligned} (\Delta E)_2 &= \frac{1}{2} \sum_{ij} w_{ij} , \\ (\Delta E)_3 &= \frac{1}{3!} \sum_{ijk} w_{ijk} - \frac{1}{2} \sum_{ijk} h_{ij} w_{jk} . \end{aligned} \quad (\text{C.8})$$

Con un fattore di correlazione a due corpi (*ansatz* BDJ) le funzioni interessanti sono la funzione di correlazione e il potenziale effettivo a 2 corpi, insieme al potenziale effettivo a 3 corpi irriducibile (equazione (C.9)), mentre le funzioni di ordine superiore sono costruite interamente come somma di prodotti di funzioni di ordine più basso. Questo comporta cancellazioni tra contributi di ordine diverso nella serie che approssima l'energia, fino ad ottenere una espansione in termini connessi

e irriducibili. La cancellazione dei termini riducibili verrà affrontata in modo più semplice nella trattazione diagrammatica nell'appendice B.

$$\begin{aligned}
 h_2(12) &\equiv h(r_{12}) = f^2(r_{12}) - 1 , \\
 w_2(12) &= \frac{1}{m} (\nabla f(r_{12}))^2 + f^2(r_{12})v(r_{12}) , \\
 w_3^I(ijk) &= -\frac{1}{4m} f^2(r_{ki}) (\nabla_j f^2(r_{ij})) (\nabla_j f^2(r_{jk})) .
 \end{aligned}
 \tag{C.9}$$

## APPENDICE D

---

### Equazioni FHNC

---

Per collegare in serie diagrammi fermionici si deve tener presente che non può esserci sovrapposizione di linee fermioniche sullo stesso punto: un punto nodale, quindi, può essere collegato attraverso due linee dinamiche, o da una linea dinamica proveniente da destra e una statistica da sinistra e viceversa.

Alla luce di queste considerazioni si possono ricavare facilmente i diagrammi nodali  $N_{dd}(r_{12})$ ,  $N_{de}(r_{12})$  e  $N_{ee}(r_{12})$ . Indicando la somma dei diagrammi nodali e non nodali tra due punti  $k$  e  $\ell$  con  $W_{xy}(r_{k\ell}) = X_{xy}(r_{k\ell}) + N_{xy}(r_{k\ell})$  le equazioni per le funzioni  $N_{xy}(r_{12})$  si scrivono nella forma

$$N_{dd}(r_{12}) = \rho \int d\mathbf{r}_3 [X_{dd}(r_{13}) + X_{de}(r_{13})] W_{dd}(r_{32}) + X_{dd}(r_{13}) W_{ed}(r_{32}) , \quad (\text{D.1a})$$

$$N_{de}(r_{12}) = \rho \int d\mathbf{r}_3 [X_{dd}(r_{13}) + X_{de}(r_{13})] W_{de}(r_{32}) + X_{dd}(r_{13}) W_{ee}(r_{32}) , \quad (\text{D.1b})$$

$$N_{ee}(r_{12}) = \rho \int d\mathbf{r}_3 [X_{ed}(r_{13}) + X_{ee}(r_{13})] W_{de}(r_{32}) + X_{ed}(r_{13}) W_{ee}(r_{32}) . \quad (\text{D.1c})$$

Nel creare diagrammi non nodali, inoltre, si deve tener conto che non tutte le connessioni in parallelo di diagrammi nodali sono possibili. Di tutti i diagrammi, gli unici che non impongono vincoli ai prodotti sono i diagrammi  $N_{dd}(r_{12})$ . Un diagramma  $N_{de}(r_{12})$ , ad esempio, può essere messo in parallelo con un  $N_{ed}(r_{12})$  ma non con se stesso. Quindi per i diagrammi nodali  $N_{dd}(r_{12})$  si può procedere esattamente come nel caso bosonico e ottenere i diagrammi non nodali  $X_{dd}(r_{12})$ , definendo

$$F(r_{12}) = f^2(r_{12}) e^{N_{dd}(r_{12})} ,$$

$$X_{dd}(r_{12}) = F(r_{12}) - N_{dd}(r_{12}) - 1 . \quad (\text{D.2a})$$

Un diagramma  $X_{de}(r_{12})$  avrà un nodale  $N_{de}(r_{12})$  connesso in parallelo ad altri diagrammi che potranno avere soltanto terminazioni di tipo dd, quindi risultanti dallo sviluppo in serie di potenze di  $F(r_{12})$

$$X_{de}(r_{12}) = F(r_{12}) N_{de}(r_{12}) - N_{de}(r_{12}) . \quad (\text{D.2b})$$

I diagrammi  $X_{ee}(r_{12})$  avranno i nodali  $N_{ee}(r_{12})$  oppure un prodotto di  $N_{de}(r_{12})$  e  $N_{ed}(r_{12})$  collegati in parallelo ai diagrammi ottenuti da  $F(r_{12})$ , ma potrebbero anche avere loop chiusi che coinvolgono soltanto i punti esterni, oppure punti esterni e uno o più punti interni

$$X_{ee}(r_{12}) = F(r_{12}) \left[ N_{ee}(r_{12}) + N_{de}(r_{12}) N_{ed}(r_{12}) - \frac{1}{\nu} \ell^2(r_{12}) - \nu N_{cc}^2(r_{12}) + N_{cc}(r_{12}) \ell(r_{12}) \right]. \quad (\text{D.2c})$$

L'ultima classe di diagrammi,  $\Gamma_{cc}$ , merita qualche attenzione in più. I diagrammi ciclici, infatti, contengono un loop di scambio non completo e devono essere necessariamente collegati in parallelo con altri diagrammi  $cc$ , dal momento che nella funzione radiale intervengono soltanto cammini di scambio chiusi<sup>1</sup>. I diagrammi  $\Gamma_{cc}$ , quindi, esistono soltanto come sottodiagrammi e vanno considerati nella costruzione in parallelo dei diagrammi intermedi, ma non nella forma finale di  $g(r)$ .

È comunque possibile definire i diagrammi nodali  $N_{cc}$ , i quali possono avere soltanto una sottodiagramma  $X_{cc}(r_{13})$  concatenato ad un'altra struttura con terminazioni  $cc$ , sia nodale che non nodale,  $W_{cc}(r_{32})$ , oppure ad una linea di correlazione statistica  $-1/\nu \ell(k_F r_{32})$

$$N_{cc}(r_{12}) = \rho \int d\mathbf{r}_3 X_{cc}(r_{13}) \left[ W_{cc}(r_{32}) - \frac{1}{\nu} \ell(k_F r_{32}) \right]. \quad (\text{D.3})$$

I diagrammi non nodali  $X_{cc}(r_{12})$ , invece, possono avere una linea di scambio tra i punti esterni o un nodale  $N_{cc}(r_{12})$  che coinvolge anche punti interni, sempre in parallelo con i diagrammi generati da  $F(r_{12})$ .

$$X_{cc}(r_{12}) = F(r_{12}) \left[ N_{cc}(r_{12}) - \frac{1}{\nu} l(k_F r_{12}) \right] - N_{cc}(r_{12}) - \frac{1}{\nu} l(k_F r_{12}). \quad (\text{D.4})$$

La funzione radiale, scritta come somma di diagrammi nodali e non nodali, diventa infine

$$g(r_{12}) = 1 + W_{dd}(r_{12}) + 2W_{ed}(r_{12}) + W_{ee}(r_{12}). \quad (\text{D.5})$$

Le D.1 e D.2, insieme all'equazione per la funzione radiale D.5, costituiscono le equazioni FHNC, da risolvere iterativamente come nel caso bosonico.

---

<sup>1</sup> Il diagramma non nodale  $X_{cc}$  più semplice è la singola linea di scambio  $-\ell(k_F r_{12})/\nu$ , anche se questa non viene solitamente inclusa nella somma  $X_{cc}$ .



### E.1 Processi di diffusione nel vuoto

Si vuole discutere il problema della diffusione di una particella da parte di un centro diffusore stazionario. L'hamiltoniana del sistema sia

$$H = H_0 + V , \quad (2.1)$$

con  $H_0$  che descrive il sistema libero e  $V$  l'hamiltoniana che descrive il centro diffusore. La prima differenza rispetto alla teoria perturbativa della Sezione 2.1 sta nel fatto che, volendo trattare urti elastici, si vuole risolvere l'equazione di Schrödinger per un vettore di stato  $|\psi\rangle$  che sia autostato dell'hamiltoniana totale con il medesimo autovalore di energia dello stato  $|\phi\rangle$  rispetto all'hamiltoniana libera  $H_0$ . La richiesta che in assenza di centro diffusore lo stato  $\psi$  si riduca allo stato imperturbato permette di scrivere la soluzione nella forma

$$|\psi\rangle = |\phi\rangle + \frac{1}{E - H_0} V |\psi\rangle . \quad (E.1)$$

A differenza della teoria delle perturbazioni per gli stati legati, la singolarità dell'operatore  $1/(E - H_0)$  non può essere risolta introducendo l'operatore di proiezione  $Q$  dal momento che sia  $H_0$  che  $H$  hanno uno spettro continuo. In questa situazione la soluzione è rappresentata dal prolungamento di  $E$  nel piano complesso

$$|\psi^\pm\rangle = |\phi\rangle + \frac{1}{E - H_0 \pm i\epsilon} V |\psi\rangle . \quad (E.2)$$

L'equazione (E.2) è nota come equazione di Lippmann-Schwinger e rappresenta una relazione tra ket, indipendentemente dalla rappresentazione degli stati. In rappresentazione delle coordinate diventa un'equazione integrale per le funzioni d'onda  $\psi^\pm(x)$

$$\langle \mathbf{x} | \psi^\pm \rangle = \langle \mathbf{x} | \phi \rangle + \int d\mathbf{x}' \left\langle \mathbf{x} \left| \frac{1}{E - H_0 \pm i\epsilon} \right| \mathbf{x}' \right\rangle \langle \mathbf{x}' | V | \psi^\pm \rangle , \quad (E.3)$$

di cui la funzione

$$G_{\pm}(\mathbf{x}, \mathbf{x}') \equiv \frac{1}{2m} \left\langle \mathbf{x} \left| \frac{1}{E - H_0 \pm i\epsilon} \right| \mathbf{x}' \right\rangle = -\frac{1}{4\pi} \frac{e^{\pm ik|\mathbf{x}-\mathbf{x}'|}}{|\mathbf{x}-\mathbf{x}'|}, \quad (\text{E.4})$$

rappresenta il nucleo integrale. In un modo del tutto equivalente la E.4 è la funzione di Green dell'equazione d'onda per la funzione  $\psi^{\pm}(x)$

$$(\nabla^2 + k^2) \psi^{\pm}(x) = 2m \langle \mathbf{x}' | V | \psi^{\pm} \rangle .$$

Il prolungamento nel semipiano  $\Im E$  positivo o negativo definisce due soluzioni che differiscono per il comportamento a grandi distanze della funzione d'onda. Se il centro di scattering può essere descritto con un potenziale diagonale (ovvero locale) localizzato in una regione finita di spazio

$$\langle \mathbf{x} | V | \mathbf{x}' \rangle = V(\mathbf{x}) \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}') ,$$

assumendo che lo stato iniziale sia un'onda piana  $\phi(\mathbf{x}) = e^{i\mathbf{k}\mathbf{x}}$  e osservando lo stato finale a distanze  $r = |\mathbf{x}|$  molto maggiori del raggio di azione del centro diffusore, la soluzione positiva per l'equazione integrale assume la forma

$$\psi^+(x) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \left[ e^{ikr} + \frac{e^{ikr}}{r} f(\mathbf{k}', \mathbf{k}) \right] , \quad (\text{E.5})$$

e rappresenta la sovrapposizione dell'onda piana di partenza con un'onda sferica uscente di ampiezza

$$f(\mathbf{k}', \mathbf{k}) = -\frac{1}{4\pi} 2m(2\pi)^3 \langle \mathbf{k}' | V | \psi^+ \rangle . \quad (\text{E.6})$$

Nella soluzione con  $-i\epsilon$  i ruoli delle onde entranti e uscenti sono semplicemente invertiti. La difficoltà di realizzare questo tipo di condizioni al contorno fa propendere a ritenere interessante soltanto la soluzione positiva. Tramite l'ampiezza di diffusione (E.6) si può ricavare la sezione d'urto differenziale come rapporto tra il numero di particelle diffuse nell'unità di tempo e il numero di particelle entranti per unità di area e tempo.

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f(\mathbf{k}, \mathbf{k}')|^2 . \quad (\text{E.7})$$

La dipendenza della sezione d'urto dalla funzione d'onda incognita può essere eliminata con l'approssimazione di Born, secondo cui per un processo di scattering debole la funzione d'onda uscente è ancora un'onda piana con

$$\psi^+(x') \rightarrow \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} e^{ikr} ,$$

ottenendo in questo modo l'ampiezza al primo ordine proporzionale alla trasformata di Fourier del potenziale.

$$f^{(1)}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = -\frac{1}{4\pi} 2m(2\pi)^3 \int d^3x' e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}')x'} V(\mathbf{x}') .$$

Le approssimazioni di ordine successivo nascono dalla definizione di un operatore di transizione T tale che

$$V |\psi^+\rangle \equiv T |\phi\rangle , \quad (\text{E.8})$$

e che soddisfi l'uguaglianza operatoriale

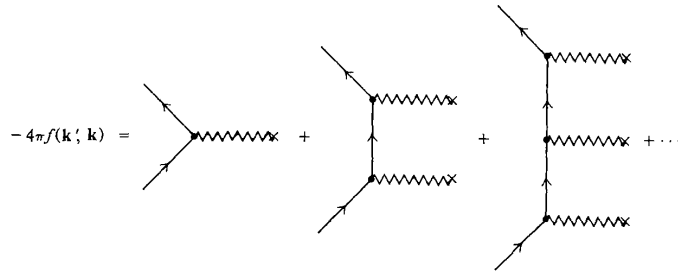
$$T = V + V \frac{1}{E - H_0 + i\epsilon} T . \quad (\text{E.9})$$

Tramite questo operatore, l'ampiezza di diffusione può scriversi

$$f(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = -\frac{1}{4\pi} 2m(2\pi)^3 \langle \mathbf{k} | T | \mathbf{k}' \rangle . \quad (\text{E.10})$$

Il significato della (E.10) è evidente nella rappresentazione grafica della figura E.1, ottenuta riscrivendo esplicitamente la matrice T come sviluppo in termini del potenziale V

$$T = V + V \frac{1}{E - H_0 + i\epsilon} V + \dots \quad (\text{E.11})$$



**Figura E.1.** L'ampiezza di scattering è data dal contributo dell'onda imperturbata più la somma di termini con una o più interazioni.

L'ampiezza di diffusione risulta, infine, somma di infiniti termini in V

$$f(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = \sum_{n=1}^{\infty} f^{(n)}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') .$$

Per una interazione invariante per traslazioni il calcolo dell'ampiezza di scattering può essere svolto con uno sviluppo delle onde piane in onde parziali, con cui si può dimostrare che l'effetto del centro diffusore è quello di cambiare il coefficiente dell'onda uscente rispetto al caso libero [28].

## E.2 Derivazione dell'equazione di Bethe-Golstone

In un mezzo, il processo di diffusione può essere descritto in modo equivalente all'equazione di Lippmann-Schwinger, tenendo però in considerazione che la presenza del mezzo limita gli stati finali accessibili a quelli non occupati. La soluzione dello scattering di due fermioni in un mezzo è data dall'equazione di Bethe-Golstone (BG). In un mezzo omogeneo, in cui le soluzioni dell'hamiltoniana libera sono onde piane, la soluzione dell'equazione di Schrödinger per due fermioni nel mare di Fermi ha una forma generale

$$\psi(1, 2) = \Omega^{-1/2} e^{i\mathbf{K}\mathbf{R}} \Omega^{-1/2} \psi_{\mathbf{K}, \mathbf{k}}(\mathbf{r}) ,$$

con  $\mathbf{R} = \frac{1}{2}(\mathbf{x}_1 + \mathbf{x}_2)$ ,  $\mathbf{K} = \mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2$ ,  $\mathbf{k} = \frac{1}{2}\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2$ . Il primo esponenziale descrive il moto del centro di massa, il secondo termine la funzione d'onda relativa tra le

due particelle. Poiché la presenza di un mare di Fermi con impulso  $k_F$  individua un sistema di riferimento privilegiato, la funzione d'onda relativa ha una dipendenza dall'impulso del centro di massa e deve soddisfare l'equazione integrale

$$\psi_{\mathbf{K},\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} + \int_{\Gamma} \frac{d^3t}{(2\pi)^3} e^{i\mathbf{t}\mathbf{r}} \frac{1}{k^2 - t^2} \langle \mathbf{t} | v | \psi_{\mathbf{K},\mathbf{k}} \rangle, \quad (\text{E.12})$$

conosciuta come equazione di Bethe-Goldstone (BG). La regione di integrazione dell'equazione BG è limitata ai valori  $\Gamma \equiv |\frac{1}{2}\mathbf{K} \pm \mathbf{t}| > k_F$ , mentre la condizione iniziale di stati del mare di Fermi implica  $|\frac{1}{2}\mathbf{K} \pm \mathbf{k}| < k_F$ .

La differenza rispetto alla diffusione libera consiste nell'aver definito una equazione integrale lievemente differente per la matrice di reazione nella materia, con un operatore di Pauli  $Q$  che proietta gli stati fuori dalla sfera di Fermi. La matrice di reazione nella materia verrà indicata con  $G$ .

### F.1 *Path integrals*

Le ampiezze di transizione della meccanica quantistica permettono di ottenere previsioni statistiche dell'evoluzione di sistemi fisici che si trovano in un determinato stato al tempo iniziale. Secondo le diverse formulazioni della teoria, queste ampiezze possono essere calcolate risolvendo un'equazione d'onda, come l'equazione di Schrödinger o l'equazione di Dirac, o, nello schema alternativo introdotto da Dirac e sviluppato da Feynman, tramite gli integrali sui cammini, o *path integrals*.

Nel formalismo dei *path integrals*, all'ampiezza di transizione che descrive il moto di una particella dalla posizione  $q_A$  alla posizione  $q_B$  nell'intervallo temporale  $t_B - t_A$  contribuiscono tutte le traiettorie che connettono le posizioni iniziale e finale, ognuna con un peso differente, espresso da un fattore di fase determinato all'integrale d'azione calcolato lungo la traiettoria in questione. L'ampiezza risultante, chiamata anche *kernel* o funzione di Green, è data dalla somma su tutti i possibili cammini  $q(t)$  e è indicata sinteticamente dalla

$$K(A, B) = \int \mathcal{D}q(t) \exp \frac{i}{\hbar} \int_{t_A}^{t_B} L(q, \dot{q}, t) , \quad (\text{F.1})$$

con le condizioni  $q(t_A) = q_A$  e  $q(t_B) = q_B$ . Il kernel può anche essere espresso in funzione degli autostati dell'hamiltoniana  $\phi_n(x)$  e dei rispettivi autovalori  $E_n$  e permette di scrivere esplicitamente l'evoluzione della funzione d'onda  $\psi(x, t)$  tra un tempo iniziale  $t_A$  e il tempo  $t_B > t_A$  tramite la relazione

$$\psi(x, t_B) = \int_{-\infty}^{+\infty} K(x, t_B; y, t_A) \psi(y, t_A) dy , \quad (\text{F.2})$$

con

$$K(x, t_B; y, t_A) = \begin{cases} \sum_n \phi_n^*(y) \phi_n(x) e^{-\frac{i}{\hbar} E_n (t_B - t_A)} & \text{se } t_B > t_A \\ 0 & \text{altrimenti} \end{cases} . \quad (\text{F.3})$$

Considerato come funzione delle variabili del punto finale, il kernel è a sua volta una funzione d'onda soluzione dell'equazione di Schrödinger con sorgente puntiforme  $\delta(x - y) \delta(t_B - t_A)$ .

Nella maggior parte delle situazioni fisiche un sistema può trovarsi in uno tra più stati possibili, ciascuno descritto dalla propria probabilità statistica. La descrizione di questi sistemi casuali, miscela incoerente di stati puri  $\alpha_i$ , richiede l'introduzione dell'operatore densità  $\rho \equiv \sum_i w_i |\alpha_i\rangle \langle \alpha_i|$  costruito come somma degli operatori di proiezione sugli stati puri, caratterizzati da un peso statistico  $w_i$ . Per un sistema all'equilibrio termico si possono scegliere come stati puri gli autostati  $\phi_n$  dell'hamiltoniana, ciascuno dei quali associato ad una probabilità esponenziale

$$p_n = \frac{1}{Z} e^{-\beta E_n} , \quad (\text{F.4})$$

con  $\beta = 1/K_B T$ , dove  $K_B$  è la costante di Boltzmann, e il fattore di normalizzazione è  $Z = \sum_n e^{-\beta E_n}$ . Una definizione equivalente

$$p_n = e^{-\beta(E_n - F)} , \quad (\text{F.5})$$

utilizza l'energia libera di Helmholtz  $F$ , dipendente dalla temperatura e legata alla funzione di partizione dalla relazione  $Z = e^{-\beta F}$ .

La matrice densità di un sistema di questo tipo alla temperatura  $T$ , descritto dalle funzioni d'onda nello spazio delle coordinate  $\phi_n(x)$ , ha la forma

$$\rho(x, y) = \sum_n \phi_n^*(y) \phi_n(x) e^{-\beta E_n} , \quad (\text{F.6})$$

e consente una completa descrizione del sistema. Il valore di aspettazione di un generico operatore  $O$

$$\langle O \rangle = \frac{1}{Z} \sum_n O_n e^{-\beta E_n} \quad \text{con} \quad O_n = \int dx \phi_n^*(x) O \phi_n(x) , \quad (\text{F.7})$$

può essere ottenuto, infatti, facendo agire l'operatore sulla matrice densità e prendendone la traccia  $\langle O \rangle = Tr\{O\rho\}$ . Il legame tra la funzione di partizione e la matrice densità è dato dalla relazione

$$Z = \int \rho(x, x) dx \equiv Tr\{\rho\} . \quad (\text{F.8})$$

Notiamo che le definizioni (F.3) e (F.6) differiscono soltanto per l'argomento del fattore esponenziale, con  $i(t_B - t_A)/\hbar$  sostituito da  $\beta$ <sup>1</sup>. È quindi naturale pensare di ottenere la matrice densità dall'estensione del formalismo dei path integrals a tempi immaginari.

## F.2 Rotazione di Wick

Formalmente il passaggio dall'ampiezza di probabilità alla funzione di partizione si ottiene dalla (F.1) prolungando la variabile temporale nel piano complesso e ruotando il cammino di integrazione con la sostituzione  $t \rightarrow \tau e^{-i\eta}$ , detta rotazione di Wick.

<sup>1</sup>La condizione  $t_B > t_A$  è sostituita dalla condizione che l'hamiltoniana sia indipendente da  $t$  e che il sistema sia in equilibrio.

Con una lagrangiana  $L = T - V$  non dipendente dal tempo

$$K(b, a) = \int \mathcal{D}q(t) \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \int_{t_A}^{t_B} dt \left[ \frac{1}{2} m \dot{q}^2 - V(q) \right] \right\}, \quad (\text{F.9})$$

e con un cammino di integrazione sull'asse immaginario ( $\eta = \pi/2$ ) l'esponenziale si trasforma in

$$\exp \left\{ -\frac{1}{\hbar} \int_{\tau_A}^{\tau_B} d\tau \left[ \frac{1}{2} m \left( \frac{dq}{d\tau} \right)^2 + V(q) \right] \right\}. \quad (\text{F.10})$$

Interpretando  $\tau$  come variabile temporale, l'argomento dell'integrale ha la forma di un'energia  $H = T + V$ . In una teoria quantistica relativistica, la rotazione di Wick trasforma la metrica minkowskiana in metrica euclidea e si è soliti indicare l'argomento dell'esponenziale come "azione euclidea"  $S_E$  o come integrale della lagrangiana euclidea.

Con  $\tau_A = 0$ ,  $\tau_B = \hbar\beta$  e con un integrale funzionale ristretto allo spazio dei cammini periodici, il kernel si trasforma nella matrice densità della meccanica statistica

$$\rho(\bar{q}, \bar{q}) = \int \mathcal{D}'q(t) \exp \left\{ -\frac{1}{\hbar} \int_0^{\hbar\beta} dt \left[ \frac{1}{2} m \left( \frac{dq}{d\tau} \right)^2 + V(q) \right] \right\}, \quad (\text{F.11})$$

dove  $\mathcal{D}'q(t)$  sta ad indicare la condizione di periodicità  $q(0) = q(\hbar\beta) = \bar{q}$ . L'ultimo passo consiste nell'integrare su tutti i possibili valori iniziali,  $\bar{q}$  per ottenere la funzione di partizione come path integral esteso a tutti i cammini periodici nell'intervallo  $\beta\hbar$

$$Z = \int_{-\infty}^{\infty} d\bar{q} \int \mathcal{D}'q(t) \exp \left\{ -\frac{1}{\hbar} \int_0^{\hbar\beta} dt \left[ \frac{1}{2} m \left( \frac{dq}{d\tau} \right)^2 + V(q) \right] \right\}. \quad (\text{F.12})$$

### F.3 Le condizioni al bordo

Il formalismo degli integrali sui cammini della sezione precedente può essere esteso al caso di un sistema con un numero finito di gradi di libertà, intendendo la traiettoria  $q$  come vettore a  $n$  componenti tra gli istanti iniziali e finali. Il passaggio ad un numero infinito di gradi di libertà, ovvero alla teoria dei campi, procede in modo analogo. Dato un campo generico  $\phi(\mathbf{x}, t)$ , con una approssimazione reticolare  $\phi_k(t) \equiv \phi(\mathbf{x}_k, t)$  si può descrivere il sistema discretizzato con gli integrali sui cammini per un numero finito di gradi di libertà e riottenere poi la teoria dei campi nel limite del continuo, ovvero nel limite di passo reticolare infinitesimo [29].

Sottintendendo questo processo di discretizzazione e limite nel continuo finale, una teoria di campo può essere analizzata in termini di funzioni di Green, indicate come  $G(\mathbf{x}\tau, \mathbf{x}'\tau')$  secondo la convenzione comune, e di funzione di partizione. È opportuno sottolineare che gli integrali sui cammini dell'Equazione (F.1) sono definiti introducendo delle funzioni a valore numerico associate ai campi che, invece, hanno una natura operatoriale.

La diversa statistica dei campi, però, determina condizioni al bordo differenti per i *path integrals*. I campi bosonici possono essere trattati semplicemente come versione infinito dimensionale delle traiettorie classiche. Pertanto le condizioni al bordo sono del tutto equivalenti alle condizioni imposte nella sezione precedente:

l'operazione di traccia sullo spazio delle configurazioni richiesta dalla funzione di partizione impone che i campi rispettino il vincolo

$$\phi(\mathbf{x}, 0) = \phi(\mathbf{x}, \beta) .$$

La statistica fermionica, invece, imponendo regole di anticommutazione tra i campi definisce uno spazio di Hilbert degli stati bidimensionale di cui si deve tener conto nella derivazione della funzione di Green<sup>2</sup> e, soprattutto, richiede l'introduzione di variabili di Grassmann per definire gli integrali sui cammini. La definizione corretta dell'operatore traccia per le variabili Grassmanniane associate agli stati coerenti [6]

$$Tr\{O\} = \langle 0|O|0\rangle + \langle 1|O|1\rangle = \int d\eta d\eta^* e^{-\eta^*\eta} \langle -\eta|O|\eta\rangle , \quad (\text{F.13})$$

connette ogni stato  $\eta$  al suo opposto  $-\eta$  e determina condizioni antiperiodiche al bordo per i campi fermionici

$$\psi(\mathbf{x}, 0) = -\psi(\mathbf{x}, \beta) .$$

Più semplicemente il vincolo di antiperiodicità si può ricavare nel formalismo delle funzioni di Green a temperatura finita a partire dalla definizione di media sull'ensemble grancanico del prodotto tempo ordinato a tempi immaginari [30]

$$G(\mathbf{x}\tau, \mathbf{x}'\tau') = -Tr \left\{ \rho_g T_\tau \left[ \psi(\mathbf{x}\tau) \psi^\dagger(\mathbf{x}'\tau') \right] \right\} , \quad (\text{F.14})$$

con  $\rho_G = e^{-\beta(H-\mu N)}/Z_G$ . Utilizzando l'invarianza per traslazioni temporali insieme la ciclicità della traccia e all'anticommutatività dei campi fermionici si può dimostrare che vale la relazione

$$G(\mathbf{x}\tau, \mathbf{x}'0) = -G(\mathbf{x}\tau, \mathbf{x}'\beta) ,$$

ovvero che la funzione di Green per i campi fermionici è antiperiodica nella variabile temporale con periodo individuato dalla temperatura inversa  $\beta$ .

---

<sup>2</sup> Per derivare il *kernel* (F.1) per campi fermionici  $\psi$  è necessario proiettare sugli autostati di  $\psi$ , indicati con il nome di stati coerenti  $\eta$ . La misura di integrazione per questi stati è data da  $\int d\eta d\eta^* e^{-\eta^*\eta}$



---

## Elenco delle figure

---

0.1	Il potenziale Lennard Jones e la funzione di distribuzione radiale per l'elio liquido. . . . .	vii
0.2	Rappresentazione grafica dell'interazione rinormalizzata. . . . .	viii
1.1	I diagrammi Yvon-Meyer a 3 punti. . . . .	8
1.2	Contributi alla costante di normalizzazione. . . . .	8
1.3	Diagrammi connessi, disconnessi, riducibili. . . . .	10
1.4	Diagrammi semplici. . . . .	11
1.5	Diagrammi composti. . . . .	11
1.6	I diagrammi per il funzionale generatore $G(0)$ . . . . .	15
1.7	La funzione di distribuzione radiale al primo ordine. . . . .	22
1.8	Classificazione dei diagrammi nel caso fermionico. . . . .	22
2.1	Gli operatori. . . . .	28
2.2	Gli elementi base dei diagrammi di Goldstone. . . . .	30
2.3	Un diagramma di Goldstone del secondo ordine. . . . .	30
2.4	Le interazioni con le particelle passive. . . . .	32
2.5	Le correzioni al primo ordine. . . . .	32
2.6	La condizione di Hartree Fock. . . . .	33
2.7	I diagrammi ladder lungo una linea fermionica. . . . .	36
2.8	I diagrammi con la matrice di reazione $G$ . . . . .	37
2.9	Un diagramma che viola il principio di esclusione di Pauli. . . . .	38
2.10	Come riottenere il principio di esclusione di Pauli. . . . .	38
2.11	La condizione di Hartree Fock per la matrice $G$ . . . . .	39
2.12	La matrice $G$ <i>on shell</i> . . . . .	39
2.13	Confronto tra elementi di matrici di scattering. . . . .	42
3.1	Un diagramma del primo ordine. . . . .	53
3.2	I nuovi diagrammi intermedi. . . . .	53
3.3	La dipendenza temporale lungo la linea fermionica. . . . .	55
3.4	La somma dei diagrammi <i>ladder</i> . . . . .	55
3.5	Le contrazioni nei diagrammi intermedi. . . . .	56

---

A.1	Le funzione di distribuzione radiale del gas libero di Fermi. . . . .	63
A.2	La funzione di Slater. . . . .	64
B.1	La cancellazione dei diagrammi riducibili. . . . .	65
E.1	L'ampiezza di scattering. . . . .	74

- [1] J. de Boer and A. Michels: *Contribution to the quantum-mechanical theory of the equation of state and the law of corresponding states. determination of the law of force of helium*. Physica, **5**(10):945 – 957, 1938. <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0031891438800379>.
- [2] P. A. Whitlock, D. M. Ceperley, G. V. Chester, and M. H. Kalos: *Properties of liquid and solid  $^4\text{He}$* . Phys. Rev. B, **19**:5598–5633, Jun 1979. <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.19.5598>.
- [3] R. Jastrow: *Many-body problem with strong forces*. Phys. Rev., **98**:1479–1484, Jun 1955. <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRev.98.1479>.
- [4] J. Goldstone: *Derivation of the brueckner many-body theory*. Proceedings of the Royal Society of London. Series A. Mathematical and Physical Sciences, **239**(1217):267–279, 1957. <http://rspa.royalsocietypublishing.org/content/239/1217/267.abstract>.
- [5] K. Huang: *Meccanica Statistica*. Zanichelli, prima edizione, 1997.
- [6] M. Gaudin, J. Gillespie, and G. Ripka: *Jastrow correlations*. Nuclear Physics A, **176**(2):237 – 260, 1971. <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/0375947471902673>.
- [7] S. Fantoni and S. Rosati: *Jastrow correlations and an irreducible cluster expansion for infinite boson or fermion systems*. Il Nuovo Cimento A (1971-1996), **20**:179–193, 1974. <http://dx.doi.org/10.1007/BF02727446>.
- [8] F. Iwamoto and M. Yamada: *Cluster development method in the quantum mechanics of many particle system, i*. Progress of Theoretical Physics, **17**(4):543–555, 1957. <http://ptp.ipap.jp/link?PTP/17/543/>.
- [9] J. W. Clark and P. Westhaus: *Method of correlated basis functions*. Phys. Rev., **141**:833–857, Jan 1966. <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRev.141.833>.

- [10] E. Feenberg and C.W. Woo: *Matrix elements of a fermion system in a representation of correlated basis functions*. Phys. Rev., **137**:A391–A405, Jan 1965. <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRev.137.A391>.
- [11] J. W. Clark and P. Westhaus: *Cluster expansions in many-fermion theory. i. “factor-cluster” formalisms*. Journal of Mathematical Physics, **9**(1):131–148, 1968. <http://link.aip.org/link/?JMP/9/131/1>.
- [12] J. W. Clark: *Variational theory of nuclear matter*. Progress in Particle and Nuclear Physics, **2**(0):89 – 199, 1979. <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/0146641079900048>.
- [13] S. Fantoni and V. R. Pandharipande: *Orthogonalization of correlated states*. Phys. Rev. C, **37**:1697–1707, Apr 1988. <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevC.37.1697>.
- [14] A. Akmal, V. R. Pandharipande, and D. G. Ravenhall: *Equation of state of nucleon matter and neutron star structure*. Phys. Rev. C, **58**:1804–1828, Sep 1998. <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevC.58.1804>.
- [15] S. Fantoni and V.R. Pandharipande: *Momentum distribution of nucleons in nuclear matter*. Nuclear Physics A, **427**(3):473 – 492, 1984. <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/0375947484902264>.
- [16] O. Benhar, A. Fabrocini, and S. Fantoni: *Nuclear-matter green functions in correlated-basis theory*. Nuclear Physics A, **550**(2):201 – 222, 1992. <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/037594749290679E>.
- [17] K. A. Brueckner, C. A. Levinson, and H. M. Mahmoud: *Two-body forces and nuclear saturation. i. central forces*. Phys. Rev., **95**:217–228, Jul 1954. <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRev.95.217>.
- [18] K. A. Brueckner and C. A. Levinson: *Approximate reduction of the many-body problem for strongly interacting particles to a problem of self-consistent fields*. Phys. Rev., **97**:1344–1352, Mar 1955. <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRev.97.1344>.
- [19] K. A. Brueckner: *Two-body forces and nuclear saturation. iii. details of the structure of the nucleus*. Phys. Rev., **97**:1353–1366, Mar 1955. <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRev.97.1353>.
- [20] K. A. Brueckner: *Many-body problem for strongly interacting particles. ii. linked cluster expansion*. Phys. Rev., **100**:36–45, Oct 1955. <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRev.100.36>.
- [21] B. D. Day: *Elements of the brueckner-goldstone theory of nuclear matter*. Rev. Mod. Phys., **39**:719–744, Oct 1967. <http://link.aps.org/doi/10.1103/RevModPhys.39.719>.
- [22] K. A. Brueckner and D. T. Goldman: *Single particle energies in the theory of nuclear matter*. Phys. Rev., **117**:207–213, Jan 1960. <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRev.117.207>.

- [23] B. H. Brandow: *Compact-cluster expansion for the nuclear many-body problem*. Phys. Rev., **152**:863–882, Dec 1966. <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRev.152.863>.
- [24] O. Benhar, A. Polls, M. Valli, and I. Vidaña: *Microscopic calculations of transport properties of neutron matter*. Phys. Rev. C, **81**:024305, Feb 2010. <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevC.81.024305>.
- [25] R. Cenni and S. Fantoni: *Variational methods for nuclear systems with dynamical mesons*. Physics Letters B, **314**(3-4):260 – 264, 1993. <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/037026939391232C>.
- [26] T. S. Walhout, R. Cenni, A. Fabrocini, and S. Fantoni: *Path integral variational methods for strongly correlated systems*. Phys. Rev. C, **54**:1622–1635, Oct 1996. <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevC.54.1622>.
- [27] R.P. Feynman, A.R. Hibbs, and D.F. Styer: *Quantum Mechanics and Paths Integrals*. Dover Publications, 2010.
- [28] J. J. Sakurai: *Meccanica Quantistica Moderna*. Zanichelli, 1996.
- [29] N. Cabibbo, L. Maiani e O. Benhar: *Elettrodinamica Quantistica*. Note del corso A.A. 2009/2010, 2010.
- [30] A.L. Fetter and J.D. Walecka: *Quantum Theory of Many-Particle Systems*. Dover Publications, 2003.
- [31] John G. Zabolitzky: *Fermi-hypernetted-chain methods and the ground state of fermion matter*. Phys. Rev. A, **16**:1258–1283, Sep 1977. <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevA.16.1258>.
- [32] L. D. Landau e E. Lifšits: *Meccanica quantistica. Teoria non relativistica*, volume 3 della serie *Fisica Teorica*. Editori Riuniti, Edizioni Mir, quinta edizione, 2004.
- [33] E. Feenberg: *Theory of Quantum Fluids*. Academic Press, 1969.
- [34] T. Hill: *Statistical mechanics*. Dover Publications, 1987.
- [35] N.H. March, W.H. Young, and S. Sampanthar: *The Many-Body Problem in Quantum Mechanics*. Cambridge University Press, 1967.
- [36] J.P. Blaizot and G. Ripka: *Quantum Theory of Finite Systems*. The Mit Press, 1986.
- [37] P.H. Hansen and I.R. McDonald: *Theory of simple liquids*. Academic Press: New York, third edition, 2006.
- [38] A. Fabrocini, S. Fantoni, and E. Krotscheck (editors): *Introduction to modern methods of quantum many-body theory and their application*, volume 7 of *Series on Advances in Quantum Many-Body Theory*. World Scientific, 2002.
- [39] O. Benhar: *Correlated basis function theory of the fermion hard-sphere fluid*, May-June 2011. Otranto.

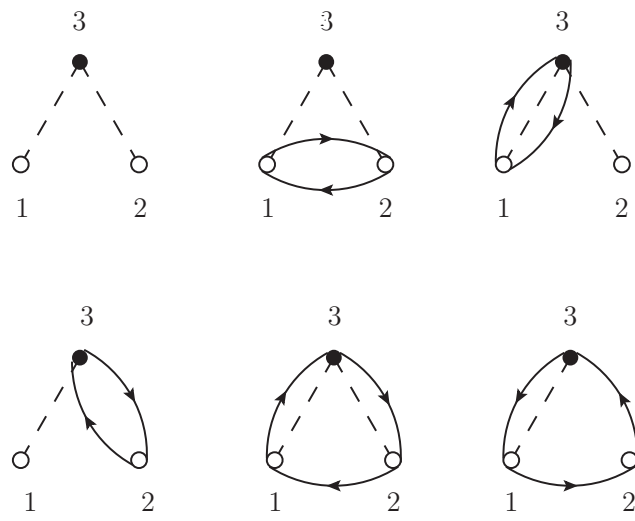
Equazione (D.2c) pag.71

$$\begin{aligned} X_{ee}(r_{12}) &= F(r_{12}) [ N_{ee}(r_{12}) + N_{de}(r_{12}) N_{ed}(r_{12}) \\ &\quad - \frac{1}{\nu} \ell^2(r_{12}) - \nu N_{cc}^2(r_{12}) + 2\ell(r_{12}) N_{cc}(r_{12}) ] - N_{ee}(r_{12}) \\ &= F(r_{12}) \left\{ N_{ee}(r_{12}) + N_{de}(r_{12}) N_{ed}(r_{12}) - \nu \left[ N_{cc}(r_{12}) - \frac{1}{\nu} \ell(r_{12}) \right]^2 \right\} \\ &\quad - N_{ee}(r_{12}) \end{aligned}$$

Equazione (D.4) pag.71

$$X_{cc}(r_{12}) = F(r_{12}) \left[ N_{cc}(r_{12}) - \frac{1}{\nu} l(k_F r_{12}) \right] - N_{cc}(r_{12}) + \frac{1}{\nu} l(k_F r_{12}) .$$

Fig. 1.7 pag.22



---

## Ringraziamenti

---

Vorrei ringraziare il prof. Benhar per i suoi preziosi insegnamenti, la pazienza e il tempo che mi ha dedicato in questi mesi. Spero di poter imparare ancora tanto.

Un ringraziamento particolare a mamma e papà, per aver creduto in me quando tutto dimostrava il contrario (ma ne siete proprio sicuri?).

Grazie alle mie sorelle Nicoletta e Carmen, a Carlo e Massimo, compagni di studi ormai di vecchia data, e ad Argia, per essere sempre presenti e per aver evitato in più occasioni che andassi completamente alla deriva.

Grazie a Daniele per le risate, soprattutto quelle dei “brutti” momenti, a Francesca per gli incoraggiamenti e le chiacchierate notturne e a Frenc per le pause “solo bicchiere” di questi lunghi anni.

È complicato ...

Almeno nei ringraziamenti sono stata rapida!