

ISTITUTO NAZIONALE DI FISICA NUCLEARE

Sezione di Genova

INFN/TC-86/3
18 Febbraio 1986

**INTEGRALI DI FEYMAN IN FISICA TEORICA,
FISICA NUCLEARE E MECCANICA QUANTISTICA**

Servizio Documentazione
dei Laboratori Nazionali di Frascati

INTEGRALI DI FEYNMAN IN FISICA TEORICA, FISICA NUCLEARE E MECCANICA STATISTICA

R.Cenni, E.Galleani, F.Napoli, G.Olivieri, P.Saracco e M.Sasseti
INFN - Sezione di Genova, e Dipartimento di Fisica dell'Università di Genova

INTRODUZIONE

Si sono qui raccolte le note del corso di "Teoria dei Campi" svolto nell'Anno Accademico 1984/85 presso la Scuola di Perfezionamento in Fisica dell'Università di Genova.

Scopo del corso era quello di illustrare con un linguaggio unitario vari aspetti della Teoria dei Campi e le loro applicazioni in diversi settori della fisica, dalle particelle elementari alla fisica nucleare, alla meccanica statistica e agli stati condensati.

Un linguaggio unitario appropriato allo scopo ci è sembrato quello dei "path integrals" e delle tecniche funzionali ad essi collegate. Tale linguaggio viene introdotto nei primi quattro capitoli, sia a temperatura zero (meccanica quantistica usuale e teoria dei campi), sia a temperatura finita (meccanica statistica quantistica).

Un primo esempio di applicazione è presentato nei capp. 5 e 6, dove è sviluppata la teoria del polarone e dove si mostra come l'integrale di Feynman introduca un sostanziale miglioramento rispetto alle teorie più convenzionali.

Nel cap. 7 si mostra come le tecniche funzionali permettano una riformulazione delle teorie di campo medio in fisica nucleare in forma assai chiara e suscettibile di ulteriori sviluppi secondo le tecniche standard degli integrali di Feynman. Lo stesso si può dire del cap. 8 dedicato alle correnti di scambio in fisica nucleare.

Il cap. 9 riguarda le teorie di gauge classiche ed il cap. 10 è dedicato agli istantoni in un campo di gauge. La durata limitata del corso non ci ha consentito la prosecuzione naturale lungo questa strada verso la quantizzazione dei campi di gauge. Nutriamo la speranza di poterlo fare nel prossimo futuro.

Le note qui presentate sono frutto di un lavoro in comune svolto da fisici teorici nucleari, delle alte energie e dello stato solido, i quali confidano che il loro sforzo "interdisciplinare" non sia del tutto inutile.

CAPITOLO 1

FORMULA DI FEYNMAN

1.1 DEFINIZIONE DEL PROBLEMA

Consideriamo un sistema quantistico unidimensionale. Sia $h(p,q)$ la sua hamiltoniana classica e siano \hat{P}, \hat{Q} gli operatori quantistici associati alle variabili classiche p, q . Autovalori ed autostati sono definiti tramite le relazioni

$$(1.1.1) \quad \hat{Q} |q\rangle = q |q\rangle$$

$$(1.1.2) \quad \hat{P} |p\rangle = p |p\rangle$$

In rappresentazione posizione si ha

$$(1.1.3) \quad |q\rangle \text{ ----> } \delta(x-q)$$

$$(1.1.4) \quad |p\rangle \text{ ----> } \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{ipx}$$

Ovviamente si ha pure

$$(1.1.5) \quad \langle q|p\rangle = \langle p|q\rangle^* = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{ipq}$$

L'hamiltoniana quantistica,

$$(1.1.6) \quad \hat{H} = h(\hat{P}, \hat{Q})$$

non e' sempre ben definita perche' in qualche caso occorre dare una prescrizione ad hoc per l'ordinamento degli operatori. Scegliamo allora la prescrizione seguente: in caso di ambiguita' porremo sempre gli operatori \hat{P} a sinistra degli operatori \hat{Q} [1].

Con la prescrizione data per l'ordinamento degli operatori e' immediato trovare

$$(1.1.7) \quad \langle p|\hat{H}|q\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-ipq} h(p,q)$$

(tale formula si ottiene facilmente sviluppando \hat{H} in serie di \hat{P} e \hat{Q} e tenendo presente la predetta prescrizione sull'ordinamento degli operatori)

Dati questi ingredienti il nostro scopo e' quello di calcolare l'elemento di matrice dell'evolutore temporale $\hat{U}(t''-t')$, ossia

$$(1.1.8) \quad \langle q''|\hat{U}(t''-t')|q'\rangle = \langle q''|e^{-i\hat{H}(t''-t')}|q'\rangle = \langle q''|t''|q't'\rangle$$

 [1] Si noti comunque che nei casi piu' comuni non si presentano problemi di ordinamento: nel caso tipico in cui $H = T + V(q)$ ad esempio non c'e' alcuna ambiguita', come pure e' irrilevante il caso in cui p e q compaiano in una forma bilineare, perche' in tal caso i due possibili ordinamenti differirebbero per una costante. Se poi si usa la prescrizione normale di simmetrizzazione bastera' riscrivere l'hamiltoniana facendo commutare gli operatori fino a che tutte le \hat{P} saranno a sinistra.

Se l'intervallo di tempo $\Delta t = t'' - t' \rightarrow 0$ si puo' pensare di scrivere \hat{U} in termini del suo sviluppo in serie al prim'ordine [2] e si ottiene, usando la (7):

$$(1.1.9) \quad \langle p | \hat{U}(t'' - t') | q' \rangle \cong \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-ipq'} [1 - h(p, q') \Delta t]$$

da cui segue

$$(1.1.10) \quad \langle q'' | \hat{U}(t'' - t') | q' \rangle = \int dp \langle q'' | p \rangle \langle p | \hat{U}(t'' - t') | q' \rangle \\ \cong \int \frac{dp}{2\pi} e^{i(q'' - q')p} [1 - h(p, q') \Delta t] \cong \int \frac{dp}{2\pi} e^{i(q'' - q')p - ih \Delta t}$$

1.2 LA FORMULA DI FEYNMAN

Avendo ottenuto l'espressione dell'elemento di matrice dell'evolvente temporale per un intervallo infinitesimo l'idea e' quella di spezzettare un intervallo generico in un numero sufficientemente grande di intervallini, ad ognuno dei quali applicare la formula precedente. Se cioe' $t'' - t'$ non e' infinitesimo, scegliamo N sufficientemente grande da rendere infinitesimo $(t'' - t')/N$ ed usiamo la proprieta' gruppale di \hat{U} per scrivere

$$\hat{U}(t'' - t') = (e^{-i\hat{H} \Delta t})^N$$

Inseriamo poi in mezzo agli operatori cosi' scritti $N-1$ set completi di stati $\int |q\rangle \langle q| dq$ e otteniamo la formula seguente:

$$(1.2.1) \quad \langle q'' | \hat{U}(t'' - t') | q' \rangle = \int dq_1 \dots dq_{N-1} \langle q'' | e^{-i\hat{H} \Delta t} | q_{N-1} \rangle \cdot \\ \cdot \langle q_{N-1} | e^{-i\hat{H} \Delta t} | q_{N-2} \rangle \dots \langle q_1 | e^{-i\hat{H} \Delta t} | q' \rangle$$

Per uniformita' di notazione conviene porre $q' = q_0$ e $q'' = q_N$. Utilizzando la (1.1.10) un numero sufficiente di volte si ottiene

$$(1.2.2) \quad \langle q'' | \hat{U}(t'' - t') | q' \rangle = \int \frac{dp_N}{2\pi} \frac{dp_{N-1} dq_{N-1}}{2\pi} \dots \frac{dp_1 dq_1}{2\pi} \\ e^{i[p_N(q_N - q_{N-1}) + \dots + p_1(q_1 - q_0)] - i[h(p_N, q_{N-1}) + \dots + h(p_1, q_0)] \Delta t}$$

[2] In realta' il problema matematico e' assai spinoso perche' la condizione ovvia per la validita' dello sviluppo sarebbe $\Delta t E_m \ll 1$, essendo E_m l'autovalore piu' grande dell'hamiltoniana. Dato che pero' lo spettro di \hat{H} nei casi pratici non e' mai limitato superiormente non e' ovvio dimostrare (anche se e' ragionevole pensarlo) che tale sviluppo e' sensato. La presente deduzione ha quindi valore puramente euristico, ed e' comunque quella seguita, ad es., da R. P. Feynman e A. R. Hibbs, "Quantum Mechanics and Path Integrals." McGraw-Hill (1965), da L. D. Faddeev e A. A. Slavnov, "Gauge Fields - Introduction to Quantum Theory", Benjamin/Cummings (1980) e da C. Itzykson e J. B. Zuber, "Quantum Field Theory", MacGraw-Hill (1980).

Passando al limite per $N \rightarrow \infty$ la relazione diventera' esatta [3]. Il numero di integrali diverra' ovviamente infinito e possiamo pensare allora di integrare sulle variabili continue $p(t)$, $q(t)$. L'esponente si trasforma in

$$i \int_{t'}^{t''} [p(t) \dot{q}(t) - h(p,q)] dt$$

e la misura (termine che qui ha un significato del tutto improprio) diviene

$$\frac{dp''}{2\pi} \prod_t \frac{dp(t) dq(t)}{2\pi}$$

con le condizioni al contorno sulla funzione $q(t)$

$$q(t') = q'$$

$$q(t'') = q''$$

Il risultato finale si scrive formalmente come segue (introducendo gli opportuni \hbar)

$$(1.2.3) \quad \langle q''t'' | q't' \rangle = \langle q'' | \hat{U}(t''-t') | q' \rangle = \int \prod_t \frac{dp dq}{2} \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \int_{t'}^{t''} [p\dot{q} - h(p,q)] dt \right\}$$

La formula cosi' ottenuta e' la cosiddetta formula di Feynman. E' immediato riconoscere all'esponente l'espressione dell'azione classica nel formalismo hamiltoniano. Il significato matematico di tale espressione e' assai difficile da precisare, e non si vuole affrontarne qui la discussione. E' pero' necessario osservare che la maggior difficolta' proviene dalla i all'esponente. In meccanica statistica invece, come vedremo nel secondo capitolo, usualmente compaiono integrali analoghi ma con esponente reale negativo per cui la misura (misura di Wiener) e' ben definita. Analoga situazione si puo' ottenere nella maggior parte dei casi di interesse fisico con la trasformazione $t \rightarrow it$ che di nuovo trasforma l'esponente in una quantita' reale negativa. Si usa parlare in questo caso di Teoria dei Campi Euclidea. La connessione tra i risultati dell'integrale funzionale (ora ben definiti matematicamente) e la fisica e' data dal teorema di Osterwalder-Schrader [4]. Questo non sara' discusso nel seguito ma una spiegazione intuitiva del perche' una Teoria dei Campi Euclidea si possa connettere con la Teoria dei Campi usuale (minkowskiana) sara' data nel capitolo 4, dopo l'introduzione delle Funzioni di Green e del Funzionale Generatore.

Lasciamo da parte le questioni di rigore matematico riguardanti la possibilita' o meno di definire l'integrale di Feynman ed esaminiamone invece il significato intuitivo. La formula di Feynman mostra che l'ampiezza $\langle q''t'' | q't' \rangle$ e' formata dalla sovrapposizione di tutte le ampiezze corrispondenti alle traiettorie possibili $q(t)$ che uniscono i due punti q' e q'' e che sono proporzionali al fattore $\exp \{i S[q(t)]/\hbar\}$.

[3] La prova di questo fatto naturalmente e' delicatissima dal punto di vista matematico, a causa delle osservazioni fatte nella nota precedente. E' tuttora argomento di ricerca la determinazione di quelle classi di funzioni per cui l'integrale di Feynman e' ben definito.

[4] Si veda ad es. K. Osterwalder e R. Schrader, Commun. Mat. Phys. 31(1973)82 e, per una trattazione piu' completa, J. Glimm e A. Jaffee, "Quantum Physics, a Functional Integral Point of View", Springer-Verlag, New York/Berlin 1981.

Questa osservazione consente di stabilire una immediata connessione tra la meccanica quantistica e quella classica. Per piccoli \hbar la funzione esponenziale $\exp\{iS[q(t)]/\hbar\}$ varia molto rapidamente anche per piccole variazioni di $S[q]$. Così possiamo stabilire un risultato notevole. Sia $q(t)$ un cammino qualsiasi. Come detto questo è caratterizzato da una ampiezza di probabilità $\exp\{iS[q(t)]/\hbar\}$ e la somma di tutte queste ampiezze su tutti i possibili cammini ci dà l'elemento di matrice dell'evolvente temporale da q' a q . Ora mostriamo che per \hbar molto piccolo dato un cammino $q(t)$ e il conseguente contributo a \hat{U} esiste un altro cammino assai prossimo a questo che dà all'evolvente temporale un contributo uguale e opposto. Infatti sia $q(t) + \delta q(t)$ un cammino variato di poco rispetto al precedente. Questo darà un contributo all'evolvente \hat{U} che vale $\exp\{iS[q + \delta q]/\hbar\} \approx \exp\{i\delta S[q]/\hbar\} \exp\{iS[q]/\hbar\}$. È chiaro che se si sceglie δq in modo che $\delta S = \pi\hbar$ la fase vale esattamente -1 e l'ampiezza associata al cammino $q(t)$ è cancellata da quella associata al cammino $q(t) + \delta q(t)$. Tutto ciò è chiaramente vero per tutti i cammini tranne quello per cui $\delta S[q] = 0$ che non può essere cancellato da nessun altro cammino ad esso prossimo e che resta perciò quello dominante. In questo modo si riottiene il principio di minima azione di Hamilton $\delta S[q] = 0$ che determina la traiettoria classica $q_{cl}(t)$ e l'ampiezza $\langle q'' | \hat{U}(t'' - t') | q' \rangle \approx \exp\{iS[q_{cl}]/\hbar\}$ coincide con la soluzione dell'equazione di Schrödinger all'ordine zero in \hbar . Lo sviluppo di $S[q]$ in potenze di $q(t) - q_{cl}(t)$ fornisce lo sviluppo della funzione d'onda in potenze di \hbar i cui primi termini sono equivalenti alla cosiddetta "approssimazione quasi-classica" della meccanica quantistica (W.K.B.).

In questo contesto è inoltre immediato passare dal formalismo hamiltoniano a quello lagrangiano. Se infatti h ha la struttura

$$(1.2.4) \quad h = \frac{p^2}{2m} + V(q)$$

gli integrali sui vari p si possono fare tutti: basta fare la trasformazione di variabile

$$e \text{ si trova} \quad p(t) \rightarrow p(t) + m\dot{q}$$

$$p\dot{q} - h(p, q) \rightarrow m\dot{q}^2/2 - V(q) - \frac{p^2}{2m}$$

e ora gli integrali sui vari $p(t)$ si possono calcolare esplicitamente e ci danno una costante \mathcal{N}^{-1} che altro non è che una costante di normalizzazione e che può comunque essere inclusa nella definizione della misura. Restano solo gli integrali su $q(t)$ e la (3) diviene

$$(1.2.5) \quad \langle q'' | q' \rangle = \frac{1}{\mathcal{N}} \int \prod_t dq(t) e^{i \int_{t'}^{t''} [m\dot{q}^2/2 - V(q)] dt}$$

ove all'esponente si riconosce l'integrale della lagrangiana del sistema, cioè di nuovo l'azione classica, questa volta nel formalismo lagrangiano.

Infine il passaggio da un sistema ad un solo grado di libertà al caso più generale di molti (eventualmente infiniti) gradi di libertà è del tutto banale. Basta infatti interpretare q non come una variabile ma come un set di variabili caratterizzate da un indice (discreto o continuo) e integrare su tutte le variabili. Nel caso di indice discreto per esempio si ottiene

$$(1.2.6) \quad \langle q''_1, \dots, q''_n, t'' | q'_1, \dots, q'_n, t' \rangle = \frac{1}{\mathcal{N}} \int \prod_t dq_1(t) \dots dq_n(t) \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \int_{t'}^{t''} L(q_1, \dots, q_n) dt \right\}$$

Nel caso di indice continuo il set di variabili diventa un campo (preferibilmente indicato con $\phi(\mathbf{x},t)$, \mathbf{x} essendo la variabile continua). Conviene naturalmente introdurre il 4-vettore $x=(\mathbf{x},t)$ e la densita' di lagrangiana \mathcal{L} . L'integrale di Feynman si scrive allora in modo ovvio come

$$(1.2.7) \quad \langle \phi(\mathbf{x}'') | \phi(\mathbf{x}') \rangle = \frac{1}{\mathcal{N}} \int \prod_x d\phi(x) \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \int \mathcal{L}[\phi] dx \right\}$$

CAPITOLO 2

PATH INTEGRALS IN MECCANICA STATISTICA

2.1 INTRODUZIONE

Il concetto di path integral introdotto da Feynman ha trovato numerose applicazioni nell'ambito della meccanica statistica. Il contenuto di questo capitolo rappresenta un primo approccio a questa tematica e tenta, attraverso il calcolo di semplici integrali funzionali, di fornire una idea, la piu' concreta possibile, del significato di path integral.

Nel secondo paragrafo viene dedotta la formula di Feynman-Kac per la funzione di partizione Z , estendendo a temperatura finita gli argomenti esposti nel primo capitolo.

Dopo alcuni cenni, contenuti nel terzo paragrafo, all'equazione della diffusione di una particella browniana, la cui soluzione ha condotto Wiener a formulare per la prima volta il concetto di integrale funzionale, nel quarto e quinto paragrafo viene calcolata la funzione di partizione per una particella libera e per un oscillatore armonico, utilizzando tecniche di utilita' generale.

2.2 LA FUNZIONE DI PARTIZIONE.

Le proprieta' fisiche di un sistema termodinamico all'equilibrio si ottengono dai potenziali termodinamici, a loro volta deducibili dalla funzione di partizione Z ; ad esempio nell'ensemble canonico l'energia libera F e' data da:

$$(2.2.1) \quad F = -\beta \ln Z$$

dove $\beta = (kT)^{-1}$ e la funzione Z e':

$$(2.2.2) \quad Z = \text{Tr}\{\exp[-\beta \hat{H}]\}$$

dove \hat{H} e' l'hamiltoniana del sistema.

E' immediato riscontrare che l'operatore $\exp\{-\beta \hat{H}\}$ si puo' ottenere formalmente dall'operatore di evoluzione temporale $\exp\{-it\hat{H}\}$ con la sostituzione $t=-i\beta$. Sfruttando questa analogia formale e' possibile esprimere la funzione di partizione tramite un integrale funzionale sui cammini $q(\tau)$ dove "il tempo immaginario" e' limitato all'intervallo $[0, \beta]$.

A tale scopo si possono definire i vettori:

$$|q, \tau\rangle = \exp\{\tau \hat{H}\} |q\rangle$$

(2.2.3)

$$\langle q, \tau| = \langle q| \exp\{-\tau \hat{H}\}$$

dove $|q\rangle$ e' l'autostato dell'operatore posizione \hat{Q} con autovalore q . Come e' facile verificare $|q, \tau\rangle$ e $\langle q, \tau|$ sono autostati destri e sinistri dell'operatore

$$(2.2.4) \quad \hat{Q}(\tau) = \exp\{\tau \hat{H}\} \hat{Q} \exp\{-\tau \hat{H}\}$$

Poiche' $\hat{U}(\tau) = \exp\{\tau \hat{H}\}$ non e' unitario (infatti $\hat{U}^\dagger(\tau) = \hat{U}(\tau) \neq \hat{U}^{-1}(\tau)$), $\hat{Q}(\tau)$ non e' hermitiano e i vettori $|q, \tau\rangle$ non costituiscono una base ortonormale. Malgrado cio' i vettori $|q, \tau\rangle$ soddisfano alla proprieta' di completezza:

$$(2.2.5) \quad \int dq |q, \tau\rangle \langle q, \tau| = 1$$

Con l'ausilio di tali vettori, Z si scrive:

$$(2.2.6) \quad Z = \int dq \langle q, \beta | q \rangle$$

In completa analogia a quanto fatto per l'operatore di evoluzione temporale suddividiamo l'intervallo $[0, \beta]$ in n intervalli di ampiezza $\varepsilon = \beta/n$. Ponendo $\tau_k = \varepsilon k$ ($k = 0, 1, \dots, n$) e utilizzando la (5), la (6) diventa:

$$(2.2.7) \quad Z = \int \prod_{k=0}^{n-1} dq_k \langle q_{k+1}, \tau_{k+1} | q_k, \tau_k \rangle$$

con $q_n = q_0$. Valutiamo poi i fattori della produttoria nella (7) al primo ordine in ε nel modo seguente: [1]

$$(2.2.8) \quad \langle q_{k+1}, \tau_{k+1} | q_k, \tau_k \rangle = \langle q_{k+1} | \exp\{-\varepsilon \hat{H}\} | q_k \rangle =$$

$$= \langle q_{k+1} | q_k \rangle - \varepsilon \langle q_{k+1} | \hat{H} | q_k \rangle + O(\varepsilon^2)$$

Introducendo gli autostati $|p\rangle$ dell'impulso \hat{P} e ricordando le (1.1.5), (1.1.7):

$$(2.2.9) \quad \langle q|p\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp\{ipq\}$$

(2.2.9)

$$\langle p|H|q\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp\{-ipq\} h(p, q)$$

la (8), a meno di termini in ε^2 , diventa:

[1] Si noti la differenza con il caso del cap. 1 (eq. (1.1.10)): in questo contesto, a causa del fatto che l'esponente e' reale negativo, il fatto che lo spettro di \hat{H} non sia limitato superiormente diviene meno rilevante, perche' gli autovalori piu' elevati sono uccisi dall'esponenziale decrescente, mentre nel caso precedente l'esponenziale si limitava a generare oscillazioni sempre piu' rapide.

$$(2.2.10) \quad \langle \dots | \dots \rangle = \int \frac{dp_k}{2\pi} \exp\{i p_k (q_{k+1} - q_k) - \xi h(p_k, q_k)\}$$

la funzione $h(p, q)$ essendo definita esattamente come nel cap. 1. Sostituendo la (10) nella (7) e passando al limite $n \rightarrow \infty$, la funzione di partizione diventa:

$$(2.2.11) \quad Z = \lim_{n \rightarrow \infty} \int \prod_{k=0}^{n-1} \frac{dp_k dq_k}{2\pi} \exp\{i p_k (q_{k+1} - q_k) - h(p_k, q_k)\}$$

$q_n = q_0$

e quindi con una notazione formale:

$$(2.2.12) \quad Z = \int \frac{Dq Dp}{2\pi} \exp\left\{ \int_0^\beta d\tau [i p \dot{q} - h(p, q)] \right\}$$

$q^{(0)} = q(\beta)$

La funzione di partizione e' quindi interpretabile come l'integrale su tutti i "cammini" $q(\tau), p(\tau)$ definiti nell'intervallo $[0, \beta]$, del peso w associato ad ogni cammino:

$$w = \exp\{i S(-i\beta)\}$$

dove $S(-i\beta)$ e' l'azione calcolata dalla lagrangiana classica a tempo immaginario:

$$S(-i\beta) = \int_0^{-i\beta} dt L(t) = -i \int_0^\beta d\tau L(t = -i\tau)$$

Si noti che nella (12) i "cammini" $p(\tau)$ non devono soddisfare ad alcuna condizione, mentre le funzioni $q(\tau)$ devono assumere valori uguali negli estremi dell'intervallo $[0, \beta]$, cioe' $q(0) = q(\beta)$. Con un'hamiltoniana della forma:

$$\hat{H} = \frac{\hat{P}^2}{2m} + \hat{V}(\hat{Q})$$

la (12) si puo' ricondurre alla piu' tradizionale formula di Feynman-Kač; infatti, sostituendo in essa p con $p + im\dot{q}$, otteniamo:

$$(2.2.13) \quad Z = \int \frac{Dq}{2\pi} \exp\left\{ - \int_0^\beta d\tau \left[\frac{m}{2} \dot{q}^2 + V(q) \right] \right\} \int Dp \exp\left\{ - \int_0^\beta d\tau \frac{p^2}{2m} \right\}$$

$q^{(0)} = q(\beta)$

Integrando su p si ottiene il risultato:

$$(2.2.14) \quad Z = \int D_w q \exp\left\{ - \int_0^\beta d\tau \left[\frac{m}{2} \dot{q}^2 + V(q) \right] \right\}$$

$q^{(0)} = q(\beta)$

con $D_w q$ che indica il differenziale di Wiener [2]:

$$(2.2.15) \quad D_w q = \lim_{n \rightarrow \infty} \prod_{k=0}^{n-1} (dq \sqrt{\frac{m}{2\pi\xi}})$$

La formula (14) e' nota come formula di Feynman-Kač. Osserviamo che l'esponente nella formula di Feynman-Kač e' interpretabile come l'azione classica a tempo reale ma in un potenziale $-V(q)$.

2.3 L'EQUAZIONE DELLA DIFFUSIONE

La misura di Wiener fu introdotta per la prima volta in un articolo del 1923 [2], nella soluzione dell'equazione della diffusione:

$$(2.3.1) \quad \frac{\partial P}{\partial t} = D \frac{\partial^2 P}{\partial x^2}$$

dove il coefficiente di diffusione D per il moto di una particella browniana e' legato alla mobilita' della particella stessa e alla temperatura del bagno termico dalla ben nota relazione di Einstein:

$$D = \mu/kT$$

Per una particella che si trova all'istante iniziale $t = 0$ nell'origine delle coordinate $x = 0$, la densita' di probabilita' che si trovi in X all'istante t, e' determinata dalla soluzione della (1) con la condizione iniziale $P(X,t=0) = \delta(X)$:

$$(2.3.2) \quad P(X,t) = (4\pi Dt)^{-1/2} \exp\{-X^2/4Dt\}$$

Wiener ha dimostrato che $P(X,t)$ e' dato anche dall'integrale funzionale condizionato:

$$(2.3.3) \quad P(X,t) = \int_{\substack{x(0)=0 \\ x(t)=X}} D_w x \exp\left\{-\int_0^t dt' \dot{x}^2/4D\right\}$$

Integrando su X la (3) si ottiene l'integrale di Wiener non condizionato, uguale a 1 per ovvie ragioni fisiche. Cioe':

$$(2.3.4) \quad \int_{x(0)=0} D_w x \exp\left\{-\int_0^t dt' \dot{x}^2/4D\right\} = 1$$

E' possibile verificare le relazioni esistenti tra le (2), (3) e (4) con un calcolo diretto [3].

2.4 LA FUNZIONE DI PARTIZIONE DI PARTICELLA LIBERA.

Rivolgiamoci al calcolo della funzione di partizione di una particella libera utilizzando il metodo del "moltiplicatore di Lagrange" [4].

Tale metodo e' particolarmente utile per eliminare eventuali vincoli sulla classe di funzioni su cui si vuole eseguire l'integrale funzionale. Osserviamo dapprima che e' possibile isolare l'integrale su

[2] N. Wiener, J. Math and Phys. 2(1923)131 e Proc. London Math. Soc. 22(1924)454. Per misura di Wiener si intende piu' propriamente la quantita':

$$d\mu_w[x] = \lim \sqrt{\frac{m}{2\pi\epsilon}} \prod_{k=1}^{n-1} (dx_k \sqrt{\frac{m}{2\pi\epsilon}}) \exp\left\{-m/2 \sum_{k=0}^{n-1} \frac{(x_{k+1} - x_k)^2}{\epsilon}\right\}$$

con $x_n = 0$.

[3] R. P. Feynman e A. R. Hibbs, "Quantum Mechanics and Path Integrals." McGraw-Hill, (1965).

[4] R. F. Dashen, B. Hasslacher e A. Neveu, Phys.Rev. D10(1974)4114.

$q = q(0) = q(\beta)$. Infatti ponendo $q(\tau) = q'(\tau) + q_0$ e $V(q) = 0$ nella (2.2.14), otteniamo:

$$(2.4.1) \quad Z = \int dq_0 \int_{q'(0)=0}^{q'(\beta)=0} D_w q' \exp\{-m \int_0^\beta d\tau \dot{q}'^2 / 2\}$$

L'integrale funzionale nella (1) e' indipendente da q_0 e quindi $\int dq_0 = L$, dove L e' la lunghezza su cui e' confinata la particella. Inoltre il vincolo $q'(\beta) = 0$ puo' essere rimosso moltiplicando l'integrando per $\delta(q'(\beta))$ la cui rappresentazione integrale e':

$$2\pi \delta(q'(\beta)) = \int d\alpha \exp\{i\alpha q'(\beta)\}$$

Invertendo l'integrale su α con l'integrale funzionale si ottiene:

$$(2.4.2) \quad Z = L \int \frac{d\alpha}{2\pi} \int_{q'(0)=0} D_w q \exp\{i\alpha q(\beta) - \frac{m}{2} \int_0^\beta d\tau \dot{q}^2\}$$

che e' ora un integrale funzionale non condizionato.

I cammini che estremizzano l'esponente della (2) sono determinati dalle equazioni:

$$\ddot{q} = 0 \quad ; \quad \dot{q}(\beta) = i\alpha/m \quad ; \quad \bar{q}(0) = 0$$

(ove la seconda tiene conto delle possibili variazioni di $q(\beta)$) che hanno per soluzione:

$$q(\tau) = i\alpha\tau/m$$

Cambiando le variabili di integrazione nella (2) secondo la trasformazione:

$$q(\tau) = x(\tau) + \bar{q}(\tau)$$

non compaiono ad argomento della funzione esponenziale termini lineari in x (completamento del quadrato) e la funzione di partizione diventa:

$$(2.4.3) \quad Z = L \int \frac{d\alpha}{2\pi} \exp\{-\frac{\alpha^2\beta}{2m}\} \int_{x(0)=0} D_w x \exp\{-m \int_0^\beta d\tau \dot{x}^2 / 2\}$$

Utilizzando la (2.3.4) e integrando su α si ottiene per Z la ben nota espressione:

$$Z = L (mkT/2\pi)^{1/2}$$

2.5 POTENZIALE QUADRATICO.

Un altro integrale funzionale che si riesce a calcolare esattamente e' quello della funzione di partizione relativa a un potenziale quadratico e dipendente dal tempo:

$$(2.5.1) \quad V(q) = -\lambda f(\tau) q^2 / 2 \quad \text{con} \quad 0 \leq f(\tau) \leq 1$$

Ovviamente per un oscillatore armonico $\lambda = -m\omega^2$ e $f(\tau) = 1$.

Come gia' fatto per la particella libera, isoliamo nella (2.2.14) l'integrale sulla condizione al contorno $q(0) = q(\beta) = q_0$, e cerchiamo inoltre i cammini $q(\tau)$ che estremizzano l'azione. Questi sono dati dalle soluzioni della equazione classica del moto per un potenziale $-V(q)$:

$$m\ddot{q} + \lambda f\bar{q} = 0 \quad \text{con} \quad \bar{q}(0) = \bar{q}(\beta) = q_0$$

Ponendo nella (2.2.14):

$$q(\tau) = x(\tau) + \bar{q}(\tau) \quad \text{con} \quad x(0) = x(\beta) = 0$$

la funzione di partizione Z diventa:

$$(2.5.2) \quad Z = \int dq_0 \exp\{-S(\beta, q_0)\} I(0)$$

dove $S(\beta, q_0)$ e' l'azione relativa ai cammini classici $\bar{q}(\tau)$ nel potenziale $-V(q)$ e $I(X)$ e' l'integrale funzionale

$$(2.5.3) \quad I(X) = \int_{\substack{x(0)=0 \\ x(\beta)=X}} D_w x \exp\left\{-\int_0^\beta d\tau [m \dot{x}^2 - \lambda f(\tau) x^2] / 2\right\}$$

Nel prosieguo di questo paragrafo viene calcolato l'integrale funzionale definito dalla (3) usando tre metodi diversi.

2.5.1 Uso Diretto Della Definizione Di $I(X)$ Come Limite [5].

Usando la definizione della misura di Wiener e ponendo $x'_k = (m/2\varepsilon)^{1/2} x_k$ la (3) si trasforma in:

$$I(X) = \lim_{n \rightarrow \infty} (m/2\pi\varepsilon)^{1/2}$$

(2.5.4)

$$\int \prod_{k=1}^{n-1} \frac{dx'_k}{\sqrt{2\pi}} \exp\left\{\sum_{k=1}^{n-1} [-(x'_{k+1} - x'_k)^2 + \varepsilon^2 f_k x_k'^2]\right\}$$

dove: $\varepsilon = \beta/n$, $f_k = \lambda f(\tau_k)/m$, $x' = (m/2\varepsilon)^{1/2} X$

Esplicitando le somme ad esponente, l'espressione per $I(X)$ puo' essere scritta sinteticamente nel modo seguente:

$$I(X) = \lim_{n \rightarrow \infty} (m/2\pi\varepsilon)^{1/2} \exp\{-mX^2/2\varepsilon\}$$

(2.5.5)

$$\int \prod_{k=1}^{n-1} dx_k \exp\{-x_i a_{ij} x_j + b_i x_i\}$$

dove gli elementi della matrice a_{ij} sono:

$$a_{ij} = \begin{bmatrix} 2 - \varepsilon^2 f_1 & -1 & 0 & \cdot & 0 \\ -1 & 2 - \varepsilon^2 f_2 & -1 & \cdot & 0 \\ 0 & -1 & 2 - \varepsilon^2 f_3 & \cdot & 0 \\ 0 & \cdot & \cdot & \cdot & -1 \\ 0 & 0 & 0 & -1 & 2 - \varepsilon^2 f_{n-1} \end{bmatrix}$$

e dove gli elementi del vettore b sono definiti da:

$$b_k = 0 \quad \text{per} \quad k \neq n-1 \quad \text{e} \quad b_{n-1} = (2m/\varepsilon)^{1/2} X$$

[5] J. M. Gel'fand e A. M. Yaglom, J. Math. Phys. 1(1960)48.
C. Itzykson e J. B. Zuber, "Quantum Field Theory", MacGraw-Hill (1980), pag. 432.

L'integrale nella (5) si può fare facilmente completando il quadrato o in altri termini ponendo:

$$(2.5.6) \quad x_i = x'_i + \bar{x}_i$$

dove \bar{x}_i è il vettore corrispondente all'estremo della forma quadratica ad esponente della (5):

$$(2.5.7) \quad \bar{x}_i = a_{ij}^{-1} b_j / 2$$

dove a_{ij}^{-1} sono gli elementi dell'inverso della matrice a.

Utilizzando le relazioni (6), (7) e la formula:

$$(2.5.8) \quad \int \prod_{k=1}^{n-1} \frac{dx_k}{\sqrt{2\pi}} \exp\{-x; a_{ij} x_j\} = [\det(a_{ij})]^{-1/2}$$

nella (5), per I(X) si ottiene il risultato:

$$(2.5.9) \quad I(X) = (m/2\pi)^{1/2} \lim_{\xi \rightarrow 0} \frac{\exp\{-mX^2 (1 - a_{n-1, n-1}^{-1}) / 2\xi\}}{[\xi \det(a_{ij})]^{-1/2}}$$

Allo scopo di valutare il $\det(a_{ij})$ indichiamo con $N(\xi p)$ ξ volte il determinante del minore di ordine p in alto a sinistra della matrice a_{ij} . $N(\xi p)$ soddisfa alla seguente formula di ricorrenza:

$$(2.5.10) \quad N(\xi p) - 2 N(\xi(p-1)) + N(\xi(p-2)) = -\xi^2 f_p N(\xi(p-1))$$

$$\text{con } N(0) = \xi \quad \text{e} \quad N(\xi) = \xi(2 - \xi^2 f_1).$$

Le (10) si riducono, al limite per $\xi \rightarrow 0$, ad una equazione differenziale per $N(\tau)$ con le opportune condizioni iniziali:

$$(2.5.11) \quad \ddot{N}(\tau) + (\lambda/m) f(\tau) N(\tau) = 0; \quad N(0) = 0 \quad \text{e} \quad \dot{N}(0) = 1$$

Osservando che $a_{n-1, n-1}^{-1} = N(\xi(p-2))/N(\xi(p-1))$, I(X), in termini della funzione $N(\tau)$, si esprime nel modo seguente:

$$(2.5.12) \quad I(X) = [m/2\pi N(\beta)]^{1/2} \exp\{-mX^2 N(\beta)/2N(\beta)\}$$

Naturalmente questi argomenti sono legittimi solo quando la forma quadratica a esponente nella (8) è definita positiva. Ciò accade quando $\lambda < \min\{\lambda_i\}$ dove i λ_i sono gli zeri dell'equazione:

$$\det[a_{ij}(\lambda)] = 0$$

Quindi i λ_i sono anche i valori caratteristici della equazione differenziale (11) con le condizioni al contorno:

$$N(0) = N(\beta) = 0$$

Applichiamo quanto ottenuto all'oscillatore armonico, per il quale $\lambda = -m\omega^2$ e $f(\tau) = 1$. L'equazione classica del moto e le sue soluzioni in questo caso sono:

$$\ddot{q} - \omega^2 q = 0 \quad \text{con} \quad \bar{q}(0) = \bar{q}(\beta) = q_0$$

$$q(\tau) = q_0 \text{Cosh}[\omega(\tau - \beta/2)] / \text{Cosh}[\omega\beta/2]$$

a cui corrisponde un'azione:

$$S(\beta, q_0) = m \omega q_0^2 \operatorname{Tanh}[\omega \beta / 2]$$

Dalla soluzione della (11) si ottiene inoltre:

$$N(\beta) = \operatorname{Senh}(\omega \beta) / \omega$$

Sostituendo i risultati appena ottenuti nelle equazioni (12) e (2) e integrando su q_0 , otteniamo per la funzione di partizione il ben noto risultato:

$$Z = [2 \operatorname{Senh}(\omega \beta / 2)]$$

2.5.2 Metodo Dello Shift.

Nel cosiddetto "metodo dello shift" per la valutazione dell'integrale funzionale $I(0)$ si sfrutta la possibilità di trovare un cambiamento di variabili con il quale $I(0)$ si riconduca a un integrale funzionale sulla sola misura di Wiener. Poniamo infatti:

$$(2.5.13) \quad \begin{aligned} y(\tau) &= x(\tau) - \int_0^\tau ds [\dot{N}(s)/N(s)] x(s) \\ &= x(\tau) - \int_0^\tau ds K(\tau, s) x(s) \end{aligned}$$

Derivando e quadrando si ottiene:

$$\int_0^\beta d\tau \dot{y}^2 = \int_0^\beta d\tau [\dot{x}^2 + (x\dot{N}/N)^2 - 2x\dot{x}\dot{N}/N]$$

Integrando per parti il terzo termine della precedente equazione e ricordando che in $I(0)$ i cammini $x(\tau)$ soddisfano alle condizioni $x(0)=x(\beta)=0$ si ottiene la relazione:

$$\int_0^\beta d\tau (m\dot{x}^2 - \lambda f x^2) = \int_0^\beta d\tau [m\dot{y}^2 - (m\ddot{N} + \lambda f N)x^2/N]$$

Scegliendo per $N(\tau)$ una qualsiasi soluzione della (11), soddisfacente a qualsiasi condizione iniziale, purché non si annulli nell'intervallo $[0, \beta]$, l'integrale $I(0)$ diventa:

$$(2.5.14) \quad I(0) = |J| \int_{\substack{y(0)=y_0 \\ y(\beta)=y_1}} D_w y \exp\{-m \int_0^\beta d\tau \dot{y}^2 / 2\}$$

dove $|J| = \det[DX/Dy]$ è lo jacobiano della trasformazione (13) e y_0, y_1 sono le condizioni al contorno sui cammini $y(\tau)$:

$$(2.5.15) \quad y_0 = 0 \text{ e } y_1 = -N(\beta) \int_0^\beta ds y(s) \dot{N}(s) / N^2(s)$$

Lo jacobiano $|J|$ della trasformazione lineare (13) si ottiene con un processo al limite ($n \rightarrow \infty$) dallo jacobiano della stessa trasformazione lineare a n -dimensioni e coincide con l'inverso del determinante di Fredholm del kernel della trasformazione stessa. In particolare:

$$|J|^{-1} = 1 + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n!} \int ds_1 \dots ds_n \begin{vmatrix} K(s_1, s_1) & \dots & K(s_1, s_n) \\ \dots & \dots & \dots \\ K(s_n, s_1) & \dots & K(s_n, s_n) \end{vmatrix}$$

Tuttavia, poiché il kernel della (13) presenta una discontinuità sulla diagonale, è necessario, nella costruzione del determinante di Fredholm, eguagliare il valore sulla diagonale del kernel alla metà della somma dei valori limite a destra e a sinistra. Usando questa prescrizione si ottiene facilmente:

$$(2.5.16) \quad |J|^{-1} = [N(0)/N(\beta)]^{1/2}$$

Infine eliminiamo dall'integrale (14) la condizione $y(\beta) = y_1$, introducendo un moltiplicatore di Lagrange come già fatto nel terzo paragrafo di questo capitolo, e completiamo il quadrato nel funzionale ad esponente tramite la sostituzione:

$$y(\tau) = z(\tau) + i(\alpha/m) \int_0^\beta ds [N(\beta)/N(s)]$$

In tal modo $I(0)$ si riduce alla seguente espressione:

$$\begin{aligned} I(0) &= [N(\beta)/N(0)]^{1/2} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\alpha}{2\pi} \exp\{-\frac{\alpha^2}{2m} \int_0^\beta d\tau [N(\beta)/N(\tau)]^2\} = \\ (2.5.17) \quad &= [(2\pi/m) N(0) N(\beta) \int_0^\beta d\tau N^{-2}(\tau)]^{-1/2} \end{aligned}$$

Si osservi che la (17) non dipende dalle condizioni iniziali con cui determinare $N(\tau)$. Tali condizioni si scelgono quindi in modo tale $N(\tau) \neq 0$ nell'intervallo $[0, \beta]$, affinché la trasformazione (13) sia regolare. Ciò è tuttavia possibile solo per $\lambda < \min\{\lambda_j\}$, come discusso nel paragrafo precedente.

2.5.3 Metodo Degli Autovalori [6].

Consideriamo ancora una volta la (3). Integrando per parti il termine in \dot{x}^2 si ottiene:

$$(2.5.18) \quad I(0) = \int_{x(0)=x(\beta)=0} D_w x \exp\{-m \int_0^\beta d\tau \int_0^\beta d\tau' x(\tau) A(\tau, \tau') x(\tau')\}$$

dove l'operatore $A(\tau, \tau')$ è definito nel modo seguente:

$$(2.5.19) \quad A(\tau, \tau') = [-\frac{\partial^2}{\partial \tau^2} - \lambda f(\tau)/m] \delta(\tau - \tau')$$

Indicando con λ_n i suoi autovalori e con $\phi_n(\tau)$ le sue autofunzioni, soddisfacenti alle condizioni al contorno $\phi_n(0) = \phi_n(\beta) = 0$ e normalizzate a 1, l'integrale (18) sui cammini $x(\tau)$ si può trasformare in un prodotto infinito di integrali sui coefficienti dello sviluppo di $x(\tau)$ in serie delle $\phi_n(\tau)$:

$$(2.5.20) \quad x(\tau) = \sum_n c_n \phi_n(\tau)$$

Sostituendo la (20) nella (18) otteniamo:

$$\begin{aligned} I(0) &= |J| \int \prod_n dc_n \exp\{-m/2 \sum_n \lambda_n c_n^2/2\} = \\ (2.5.21) \quad &= |J| \{\prod_n \lambda_n\}^{-1/2} \prod_n \int dc_n \exp\{-m c_n^2/2\} \end{aligned}$$

dove $|J|$ è lo jacobiano della trasformazione (19).

Antitrasformando la (21) con l'ausilio della (19) e introducendo l'operatore $A_0(\tau, \tau')$ relativo alla particella libera ($\lambda = 0$), otteniamo:

$$(2.5.22) \quad I(0) = (m/2\pi\beta)^{1/2} [\det(A_0)/\det(A)]^{1/2}$$

Calcoliamo ora, a titolo d'esempio, $\det(A_0)$ e $\det(A)$ per l'oscillatore armonico attraverso la determinazione degli autovalori:

[6] S. Coleman, "The Use of Instantons", Proceeding of the XV International School of Subnuclear Physics, ed. da A. Zichichi (Plenum Press, New York (1979)).

$$-\ddot{\phi}_n^{(\omega)}(\tau) = \lambda_n^{(\omega)} \phi_n^{(\omega)}(\tau) \quad [\phi_n^{(\omega)}(0) = \phi_n^{(\omega)}(\beta) = 0]$$

che fornisce:

$$\lambda_n^{(\omega)} = (\pi n / \beta)^2 \quad (n=1, 2, \dots)$$

Per l'oscillatore armonico si ha invece:

$$-\ddot{\phi}_n(\tau) + \omega^2 \phi_n(\tau) = \lambda_n \phi_n(\tau) \quad [\phi_n(0) = \phi_n(\beta) = 0]$$

$$\lambda_n = [\omega^2 + (\pi n / \beta)^2] \quad (n=0, 1, 2, \dots)$$

Sostituendo nella (22) i risultati ottenuti si ricava per $I(0)$ la relazione:

$$I(0) = \left\{ (2\pi\beta/m) \prod_{n=1}^{\infty} [1 + (\beta\omega/\pi n)^2] \right\}$$

Da una nota formula per le produttorie infinite si ottiene il risultato:

$$I(0) = [(2\pi/m\omega) \text{Senh}(\beta\omega)]^{-1/2}$$

CAPITOLO 3

I PATH INTEGRALS NELLA RAPPRESENTAZIONE OLOMORFA

3.1 INTRODUZIONE

In questo capitolo si vuole estendere il calcolo della funzione di partizione Z a un sistema costituito da N particelle identiche. Nella formula di Feynman-Kač e' in tal caso necessario tener conto della simmetria per scambio di particelle simmetrizzando opportunamente le condizioni al contorno sui cammini $q(\tau)$. Cio' risulta tuttavia molto complicato; e' possibile ovviare a tale difficoltà lavorando nell'ambito della rappresentazione olomorfa, adeguata a descrivere stati quantistici a numero di particelle **non definito**. L'utilizzazione di tali stati corrisponde in meccanica statistica alla realizzazione dell'ensemble canonico grande. In questo ensemble Z e' dato dalla formula:

$$(3.1.1) \quad Z = \text{Tr} \{ \hat{U}_\beta \} = \text{Tr} \{ \exp[-\beta(H - \mu N)] \}$$

dove μ e' il potenziale chimico. Da questa funzione di partizione si puo' ricavare il potenziale termodinamico $\Omega = F - \mu N$ tramite la relazione:

$$(3.1.2) \quad \Omega = -\beta^{-1} \ln Z$$

Nel secondo paragrafo di questo capitolo introduciamo la rappresentazione olomorfa [1], fornendo le regole di calcolo in tale rappresentazione sia per i bosoni che per i fermioni. Nel terzo paragrafo scriviamo \hat{U}_β e quindi la funzione di partizione Z come integrale funzionale sullo spazio delle funzioni olomorfe, calcolandone nel quarto paragrafo, a titolo d'esempio, il valore per un sistema non interagente sia di bosoni che di fermioni.

[1] Una descrizione accurata della rappresentazione olomorfa si trova nel libro di F. A. Berezin, "The Method of Second Quantization", Academic Press, New-York and London (1966). Una versione semplificata e' invece fornita dal II capitolo del gia' citato L. D. Fadeev e A. A. Slavnov, "Gauge Fields. Introduction to Quantum Theory", Benjamin Cummings P.C., (1980).

3.2 LA RAPPRESENTAZIONE OLOMORFA

L'idea di base della rappresentazione oloomorfa e' quella di rappresentare un vettore di stato dello spazio di Hilbert a N particelle come derivata funzionale di un funzionale opportunamente costruito. Sia infatti:

$$(3.2.1) \quad \bar{\phi} [z^*] = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{\sqrt{n!}} \int d^n x K_n^\phi(x_1, \dots, x_n) z^*(x_1) \dots z^*(x_n)$$

dove la variabile x rappresenta il set di numeri quantici atti a definire lo stato quantistico del sistema, $d^n x = dx_1 \dots dx_n$, $K_n^\phi(x_1, \dots, x_n)$ e' la funzione d'onda di un sistema a n particelle nella rappresentazione x e $z^*(x)$ e' un'arbitraria funzione regolare. E' immediato ricavare dalla (1) che:

$$\sqrt{n!} K_n^\phi(x_1, \dots, x_n) = \left. \left\{ \frac{\delta}{\delta z^*(x_1)} \dots \frac{\delta}{\delta z^*(x_n)} \bar{\phi} [z^*] \right\} \right|_{z^*=0}$$

Quindi $\bar{\phi} [z^*]$ e' utilizzabile come rappresentativo di un vettore $|\phi\rangle$ dello spazio di Fock, somma diretta degli spazi di Hilbert a numero di particelle fissato, di cui $K_n^\phi(x_1, \dots, x_n)$ ne rappresenta la proiezione in uno dei suoi sottospazi. I coefficienti $\sqrt{n!}$ hanno lo scopo di preservare la normalizzazione a 1 delle K_n^ϕ col prodotto scalare che verra' introdotto in seguito.

Per particelle identiche le funzioni $z^*(x)$ devono soddisfare a regole di commutazione determinate dalla statistica. Permutiamo infatti nella (3.2.1) $z^*(x_1)$ con $z^*(x_2)$ usando la regola di commutazione:

$$z^*(x_1) z^*(x_2) = (-1)^\eta z^*(x_2) z^*(x_1)$$

e successivamente poniamo $x_1 = x'_2$ e $x_2 = x'_1$. La (1) diventa:

$$(3.2.2) \quad \bar{\phi} [z^*] = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^\eta}{\sqrt{n!}} \int d^n x' K_n^\phi(x'_2, x'_1, \dots, x'_n) z^*(x'_1) z^*(x'_2) \dots z^*(x'_n)$$

Poiche' $K_n^\phi(x_1, \dots, x_n)$ e' una funzione simmetrica nella statistica di Bose e antisimmetrica nella statistica di Fermi e poiche' $\bar{\phi} [z^*]$ deve essere univocamente definito, il confronto della (1) con la (2) indica che deve essere $\eta = 0$ per i bosoni e $\eta = 1$ per i fermioni. Quindi le $z^*(x)$ sono funzioni che mentre per i bosoni appartengono ad un'algebra commutativa ordinaria, per i fermioni appartengono ad un'algebra anticommutativa. Tale algebra e' detta algebra di Grassman.

3.2.1 Operazioni Sui Funzionali $\bar{\phi}$. Bosoni.

Limitandoci qui ai bosoni, considereremo le variabili $z^*(x)$ come ordinarie variabili commutative. Determiniamo dapprima a quale operazione nello spazio di Fock corrisponda la moltiplicazione di $\bar{\phi} [z^*]$ per $z^*(x)$. Dalla (1) si ottiene:

$$(3.2.3) \quad z^*(x) \bar{\phi} [z^*] = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{\sqrt{n!}} \int d^n x' K_n^\phi(x_1, \dots, x_n) \delta(x_{n+1}, -x) z^*(x_1) \dots z^*(x_n) z^*(x_{n+1})$$

Introduciamo nella (3) la funzione d'onda a n+1 particelle simmetrizzata e opportunamente normalizzata:

$$K_{n+1}^x(x_1, \dots, x_n, x_{n+1}) = \frac{1}{\sqrt{n+1}} \sum_P K_n^\phi(x_1, \dots, x_n) \delta(x_{n+1} - x)$$

dove la somma e' estesa alle n+1 permutazioni di x_{n+1} con le x_n . K_{n+1}^x e' per costruzione simmetrica nello scambio tra loro degli argomenti e normalizzata a 1; essa rappresenta la funzione d'onda K_n^ϕ a cui e' stata aggiunta una particella con i numeri quantici x . Ricaviamo allora l'eguaglianza:

$$(3.2.4) \quad \psi_x[z^*] = z^*(x) \bar{\phi}[z^*] = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{\sqrt{(n+1)!}} \int d^{n+1}x K_{n+1}^x(x_1, \dots, x_{n+1}) z^*(x_1) \dots z^*(x_{n+1})$$

Abbiamo cioe' ottenuto che essendo $\bar{\phi}[z^*]$ il funzionale rappresentativo di un vettore $|\phi\rangle$ dello spazio di Fock, $\psi_x[z^*] = z^*(x) \bar{\phi}[z^*]$ e' il rappresentativo del vettore $|\psi_x\rangle = \hat{a}^+(x) |\phi\rangle$ dove $\hat{a}^+(x)$ e' l'operatore di creazione di una particella con i numeri quantici x .

Dimostriamo ora invece che l'applicazione dell'operatore di distruzione $\hat{a}(x)$ corrisponde nello spazio dei funzionali $\bar{\phi}[z^*]$ alla derivata funzionale. Si ha infatti:

$$(3.2.5) \quad \tilde{\psi}_x[z^*] = \frac{\delta}{\delta z^*(x)} \bar{\phi}[z^*] = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{\sqrt{n!}} \int d^n x \tilde{K}_n^x(x_1, \dots, x_n) z^*(x_1) \dots z^*(x_n)$$

dove abbiamo posto

$$\tilde{K}_{n-1}^x(x_1, \dots, x_{n-1}) = \sqrt{n} K_n^\phi(x, x_1, \dots, x_{n-1})$$

la funzione d'onda normalizzata a 1 che rappresenta lo stato K_n^ϕ a cui e' stata tolta una particella con i numeri quantici x . Quindi, se $\bar{\phi}[z^*]$ e' il rappresentativo di $|\phi\rangle$,

$$\tilde{\psi}_x[z^*] = \frac{\delta}{\delta z^*(x)} \bar{\phi}[z^*]$$

e' il rappresentativo di $|\tilde{\psi}_x\rangle = \hat{a}(x) |\phi\rangle$.

Vogliamo ora definire un prodotto scalare nello spazio funzionale in modo tale che coincida con l'usuale prodotto scalare nello spazio di Fock:

$$(3.2.6) \quad \langle \psi | \phi \rangle = \sum_{n=0}^{\infty} \int d^n x K_n^\psi(x_1, \dots, x_n)^* K_n^\phi(x_1, \dots, x_n)$$

A tale scopo definiamo preliminarmente una misura per l'integrale continuo tale che:

$$(3.2.7) \quad \int \frac{Dz^*(x) Dz(x)}{2 \pi i} \exp\{-\int z^*(x) z(x) dx\} = 1$$

Nel caso in cui i valori dei gradi di liberta' x definiscano un reticolo discreto la (7) coincide con una produttorina di integrali ordinari; per x appartenente invece ad un insieme continuo di valori il differenziale $Dz^* Dz / (2\pi i)$ puo' essere definito con un processo di limite di una produttorina discreta di integrali su z e z^* presi su un reticolo di passo Δ . In particolare:

$$\int \frac{Dz^* Dz}{2\pi i} \exp\{-\int z^* z dx\} = \lim_{\Delta \rightarrow 0} \int \prod_k \frac{dz_k^* dz_k \Delta}{2\pi i} \exp\{-\sum_k z_k^* z_k\}$$

Il prodotto scalare tra due vettori $|\psi\rangle$ e $|\phi\rangle$ in termini dei loro rappresentativi $\psi[z^*]$ e $\phi[z^*]$ e' definito allora nel modo seguente:

$$(3.2.8) \quad \langle \psi | \phi \rangle = \int \frac{Dz^* Dz}{2\pi i} (\psi[z^*])^* \phi[z^*] \exp\{-\int z^* z dx\}$$

L'equivalenza tra la (8) e la (6) e' facilmente dimostabile usando un'opportuna regola di integrazione per parti, che ci limitiamo semplicemente ad enunciare [2]. Siano dati i funzionali differenziabili $f[z^*, z]$ e $g[z^*, z]$ tali che:

$$(3.2.9) \quad \lim_{|z| \rightarrow \infty} f[z^*, z] g[z^*, z] = 0 \quad \text{con} \quad |z|^2 = \int z^* z dx$$

Vale allora la seguente formula di integrazione per parti:

$$(3.2.10) \quad \int \frac{Dz^* Dz}{2\pi i} f \frac{\delta}{\delta z^*(x)} g = - \int \frac{Dz^* Dz}{2\pi i} \left\{ \frac{\delta}{\delta z^*(x)} f \right\} g$$

dove il termine finito e' nullo a causa della condizione (9).

Esplicitiamo nella (8) la forma dei funzionali $\psi[z^*]$ e $\phi[z^*]$, invertendo inoltre l'integrazione funzionale con la sommatoria. Si ricava:

$$(3.2.11) \quad \langle \psi | \phi \rangle = \sum_{n,m} \frac{1}{\sqrt{n! m!}} \int d^n x d^m y K_n^\psi(x_1, \dots, x_n)^* K_m^\phi(y_1, \dots, y_m)$$

$$\int \frac{Dz^* Dz}{2\pi i} z(x_1) \dots z(x_n) z^*(y_1) \dots z^*(y_m) \exp\{-\int z^* z dx\}$$

Osservando che:

$$z^*(y_1) \exp\{-\int z^* z dx\} = - \frac{\delta}{\delta z(y_1)} \exp\{-\int z^* z dx\}$$

usando sia la regola di integrazione per parti (10) che la simmetria delle funzioni d'onda K_n^ψ e K_m^ϕ la (11) diventa:

$$(3.2.12) \quad \langle \psi | \phi \rangle = \sum_{n,m} \frac{1}{\sqrt{n! m!}} \int d^n x d^{m-1} y K_n^\psi(x_1, \dots, x_n)^* K_m^\phi(x_1, y_2, \dots, y_m)$$

$$\cdot \int \frac{Dz^* Dz}{2\pi i} z(x_1) \dots z(x_n) z^*(y_2) \dots z^*(y_m) \exp\{-\int z^* z dx\}$$

[2] Per una dimostrazione rigorosa di questa regola di integrazione per parti si veda il gia' citato F. A. Berezin, "The Method of Second Quantization", pag. 39.

Ripetendo piu' volte la stessa procedura, ci si rende facilmente conto che gli unici termini non nulli sono quelli per cui $n = m$, e si ottiene cosi' la (6).

Si noti che, con la definizione introdotta di prodotto scalare (8), la moltiplicazione per $z^*[x]$ e la derivata funzionale $\delta/\delta z^*[x]$ sono hermitiane coniugate, come ci si doveva aspettare, essendo l'equivalente nella rappresentazione olomorfa della applicazione rispettivamente di $\hat{a}^+(x)$ e $\hat{a}(x)$ nello spazio di Fock. Ponendo infatti:

$$|\bar{\phi}\rangle = \hat{a}(x) |\phi\rangle \quad \text{e} \quad |\bar{\psi}\rangle = \hat{a}^+(x) |\psi\rangle$$

si ottiene:

$$\begin{aligned} \langle \psi | \bar{\phi} \rangle &= \int \frac{Dz^* Dz}{2\pi i} (\psi[z^*])^* z^*(x) \phi[z^*] \exp\{-\int z^* z dx\} = \\ &= \int \frac{Dz Dz}{2\pi i} \left(\frac{\delta}{\delta z^*(x)} \psi[z^*] \right) \phi[z^*] \exp\{-\int z^* z dx\} = \langle \bar{\psi} | \phi \rangle \end{aligned}$$

Passiamo ora ad esaminare il rappresentativo di un operatore lineare \hat{A} tale che $|\psi\rangle = \hat{A} |\phi\rangle$. A e' rappresentabile in termini dei suoi elementi di matrice, cioe' dai coefficienti che intervengono nelle relazioni del tipo:

$$(3.2.13) \quad K_n^\psi(y_1, \dots, y_n) = \sum_m \int d^m x \quad A_{nm}(y_1, \dots, y_n | x_1, \dots, x_m) K_m^\phi(x_1, \dots, x_m)$$

Con gli elementi di matrice A_{nm} costruiamo il funzionale:

$$(3.2.14) \quad A[z^*, z] = \sum_{nm} \frac{1}{\sqrt{n! m!}} \int d^n y d^m x \quad A_{nm}(y|x) z^*(y_1) \dots z^*(y_n) z(x_1) \dots z(x_m)$$

Il modo di operare del funzionale $A[z^*, z]$ e' quello di un kernel integrale definito dalla formula seguente:

$$(3.2.15) \quad \psi[z^*] = \int \frac{D\xi^* D\xi}{2\pi i} A[z^*, \xi] \bar{\phi}[\xi^*] \exp\{-\int \xi^* \xi dx\}$$

La dimostrazione dell'equivalenza tra la (15) e la (13) e' facilmente ottenuta seguendo lo stesso procedimento usato nel calcolo del prodotto scalare. Inoltre il prodotto di due operatori $\hat{A} \cdot \hat{B} = \hat{C}$ e' rappresentato da una sorta di convoluzione:

$$(3.2.16) \quad C[z^*, z] = \int \frac{D\xi^* D\xi}{2\pi i} A[z^*, \xi] B[\xi^*, z] \exp\{-\int \xi^* \xi dx\}$$

Osserviamo poi che i kernel rappresentativi degli operatori di creazione e di distruzione sono:

$$(3.2.17) \quad \begin{aligned} \hat{a}^+(x) &\text{ ---> } \bar{\alpha}[z^*, z] = z^*(x) \exp\{\int z^* z dx\} \\ \hat{a}(x) &\text{ ---> } \alpha[z^*, z] = z(x) \exp\{\int z^* z dx\} \end{aligned}$$

Un risultato importante derivante dalla (17) e dalla (16) e' che dato un operatore in forma normale (cioe' con tutti gli operatori di distruzione a destra e quelli di creazione a sinistra):

$$(3.2.18) \quad \hat{A} = \sum_{n,m} \int d^n x d^m y K_{nm}(x|y) \hat{a}^+(x_1) \dots \hat{a}^+(x_n) \hat{a}(y_1) \dots \hat{a}(y_m)$$

e costruito il funzionale $A_N[z^*, z]$ dalla (18) sostituendo $\hat{a}^+(x)$ con $z^*(x)$ e $\hat{a}(x)$ con $z(x)$, si puo' ricavare immediatamente il kernel $A[z^*, z]$ attraverso la seguente formula:

$$(3.2.19) \quad A[z^*, z] = A_N[z^*, z] \exp\{\int z^* z dx\}$$

Per concludere questo paragrafo ci resta da calcolare la traccia di un operatore nello spazio di Fock. Questa e' ovviamente definita attraverso gli elementi di matrice dell'operatore dalla relazione:

$$\text{Tr}\{\hat{A}\} = \sum_n \int d^n x A(x_1, \dots, x_n | x_1, \dots, x_n)$$

Utilizzando la definizione (14) del funzionale $A[z^*, z]$ e procedendo come gia' fatto per il prodotto scalare si ottiene il risultato:

$$(3.2.20) \quad \text{Tr}\{\hat{A}\} = \int \frac{Dz^* Dz}{2\pi i} A[z^*, z] \exp\{-\int z^* z dx\}$$

3.2.2 Operazioni Sui Funzionali $\bar{\Phi}$. Fermioni.

Come gia' visto in precedenza il funzionale (1) e' un buon rappresentativo di uno stato fermionico solo se $z^*(x)$ (e quindi $z(x)$) appartiene ad un'algebra anticommutativa. Cioe':

$$z^*(x)z^*(x') = -z^*(x')z^*(x) \quad \text{e} \quad z^*(x)^2 = 0$$

$$(3.2.21) \quad z^*(x)z(x') = -z(x')z^*(x)$$

$$z(x)z(x') = -z(x')z(x) \quad \text{e} \quad z(x)^2 = 0$$

Ovviamente anche i differenziali dz^* e dz appartengono alla stessa algebra ed e' quindi necessario ridefinire accuratamente cosa si intenda per derivare e per integrare nell'algebra di Grassmann.

i) Derivata.

Si definisce una derivata destra e una sinistra nel modo seguente:

$$(3.2.22) \quad \overrightarrow{\frac{\delta}{\delta z(x)}} z(x_1)z(x_2)z(x_3) \dots = +\delta(x-x_1) z(x_2)z(x_3) \dots \\ -\delta(x-x_2) z(x_1)z(x_3) \dots \\ +\delta(x-x_3) z(x_1)z(x_2) \dots \\ - \dots \dots \dots$$

$$(3.2.23) \quad \dots z(x_{n-2})z(x_{n-1})z(x_n) \overleftarrow{\frac{\delta}{\delta z(x)}} = +\delta(x-x_n) \dots z(x_{n-2})z(x_{n-1}) \\ -\delta(x-x_{n-1}) \dots z(x_{n-2})z(x_n) \\ +\delta(x-x_{n-2}) \dots z(x_{n-1})z(x_n) \\ - \dots \dots \dots$$

Quindi per calcolare la derivata sinistra (destra) di $z(x_1) \dots z(x_n)$ rispetto a $z(x)$ si deve permutare $z(x)$ al primo (ultimo) posto nel monomio apportando l'opportuno cambiamento di segno e quindi sopprimerlo sostituendolo con una $\delta(x_i - x)$. Analogamente si definiscono derivate destre e sinistre rispetto a $z^*(x)$.

ii) Integrali

Si definiscono i seguenti integrali sull'algebra di Grassmann:

$$(3.2.24) \quad \int dz^* = \int dz = 0 \quad \text{e} \quad \int z dz = \int z^* dz^* = 1$$

Vediamo ora come queste regole di derivazione e integrazione modifichino per i fermioni le operazioni sui funzionali discusse nel paragrafo precedente per i bosoni. Per ragioni di semplicità e brevità dimostreremo le formule introdotte solo nel caso limite in cui si abbia un solo grado di libertà, lasciando al lettore il compito di estrapolarle al caso più generale. Per un sistema a un solo grado di libertà il funzionale (1) diventa il semplice polinomio:

$$\phi(z^*) = \varphi_0 + \varphi_1 z^*$$

a) Prodotto scalare

Siano $\phi(z^*)$ e $\psi(z^*)$ i rappresentativi dei vettori $|\phi\rangle$ e $|\psi\rangle$. Il prodotto scalare ordinario è:

$$(3.2.25) \quad \langle \psi | \phi \rangle = \psi_0^* \varphi_0 + \psi_1^* \varphi_1$$

Usando le (21) e (24), si dimostra facilmente che:

$$\langle \psi | \phi \rangle = \int dz^* dz [\psi(z^*)]^* \phi(z^*) \exp\{-z^* z\}$$

Per un sistema a più gradi di libertà:

$$(3.2.26) \quad \langle \psi | \phi \rangle = \int Dz^* Dz (\psi[z^*])^* \phi[z^*] \exp\{-\int z^* z dx\}$$

dove la misura $Dz^* Dz$ è definita in modo tale che:

$$\int Dz^* Dz \exp\{-\int z^* z dx\} = 1$$

b) \hat{a}^+ e \hat{a} .

Osserviamo che:

$$z^* \phi(z^*) = \varphi_0 z^* \quad \text{e} \quad \frac{\bar{d}}{dz^*} \phi(z^*) = \varphi_1$$

e quindi la moltiplicazione per z^* è l'equivalente di \hat{a}^+ e la derivazione rispetto a z^* è l'equivalente di \hat{a} . Per più gradi di libertà si ha invece:

$$(3.2.27) \quad \begin{aligned} \hat{a}^+(x) |\phi\rangle &\longrightarrow z^*(x) \phi[z^*] \\ \hat{a}(x) |\phi\rangle &\longrightarrow \frac{\bar{\delta}}{\delta z^*(x)} \phi[z^*] \end{aligned}$$

c) Gli operatori

Per un sistema ad un solo grado di libertà un operatore ha solo quattro elementi di matrice, definiti dall'operazione:

$$(3.2.28) \quad \psi_i = A_{ij} \phi_j$$

Il kernel (14) coincide allora con la funzione:

$$(3.2.29) \quad A(z^*, z) = A_{00} + A_{01} z + A_{10} z^* + A_{11} z^* z$$

Come si può verificare direttamente il kernel $A(z^*, z)$ opera nel modo seguente:

$$\psi(z^*) = \int d\xi^* d\xi A(z^*, \xi) \phi(\xi) \exp\{-\xi^* \xi\}$$

In generale:

$$(3.2.30) \quad \psi [z^*] = \int D\xi^* D\xi A[z^*, \xi] \phi[\xi^*] \exp\{-\int \xi^* \xi dx\}$$

Analogamente il prodotto di due operatori segue la regola:

$$(3.2.31) \quad C[z^*, z] = \int D\xi^* D\xi A[z^*, \xi] B[\xi^*, z] \exp\{-\int \xi^* \xi dx\}$$

Inoltre le funzioni rappresentative di \hat{a}^+ e \hat{a} sono rispettivamente:

$$\bar{\alpha}(z^*, z) = z^* \exp\{z^* z\} \quad \text{e} \quad \alpha(z^*, z) = z \exp\{z^* z\}$$

Infatti espandendo le funzioni esponenziali e ricordando che nell'algebra di Grassmann $z^{*2} = z^2 = 0$ e usando la definizione degli integrali (21) si ricava:

$$\int d\xi^* d\xi f(\varphi_0 + \varphi_1 \xi^*) \exp\{z^* \xi - \xi^* \xi\} = \varphi_1$$

$$\int d\xi^* d\xi z^* (\varphi_0 + \varphi_1 \xi^*) \exp\{z^* \xi - \xi^* \xi\} = \varphi_0 z^*$$

Si puo' cosi' costruire, attraverso la formula per il prodotto di operatori (31), la relazione tra il kernel $A(z^*, z)$ e la funzione $A_N(z^*, z)$ dedotta dall'operatore in forma normale:

$$A(z^*, z) = A_N(z^*, z) \exp\{z^* z\}$$

che per un sistema a molti gradi di liberta' diventa:

$$(3.2.32) \quad A[z^*, z] = A_N[z^*, z] \exp\{-\int z^* z dx\}$$

La traccia di \hat{A} si ottiene infine direttamente dalle formule (28) e (29):

$$\text{Tr}\{\hat{A}\} = A_{00} + A_{11} = \int dz^* dz A(-z^*, z) \exp\{-z^* z\}$$

che in generale diventa:

$$(3.2.33) \quad \text{Tr}\{\hat{A}\} = \int Dz^* Dz A[-z^*, z] \exp\{-\int z^* z dx\}$$

La differenza sostanziale tra la (33) e la (20) risiede nella differenza di segno che compare nell'argomento del kernel $A[z^*, z]$ ed e' l'origine, nello schema degli integrali funzionali, del diverso comportamento, a seconda della statistica, delle funzioni di Green di temperatura per traslazioni di β nei tempi immaginari.

--

3.3 LA FUNZIONE DI PARTIZIONE NELLA RAPPRESENTAZIONE OLOMORFA.

Come gia' visto nella (3.1.1) la funzione di partizione nell'ensemble canonico grande e' data da:

$$(3.3.1) \quad Z = \text{Tr}\{\hat{U}_\rho\} = \text{Tr}\{\exp[-\beta \hat{H}']\}$$

dove $\hat{H}' = \hat{H} - \mu \hat{N}$, μ e' il potenziale chimico e la traccia e' eseguita su tutto lo spazio di Fock.

L'hamiltoniana "efficace" \hat{H}' e' generalmente scritta in forma normale (o comunque e' riconducibile alla forma normale eseguendo le opportune commutazioni), e ad essa corrisponde il funzionale $H'[z^*, z]$; inoltre la traccia e' eseguibile attraverso l'integrazione del kernel $U_\beta[z^*, z]$ (eq.

(3.2.20) o (3.2.31)). E' quindi necessario trovare la relazione esistente tra $U_\beta[z^*, z]$ e $H'[z^*, z]$. A tale scopo suddividiamo l'intervallo $[0, \beta]$ in n intervalli di ampiezza $\varepsilon = \beta/n$ e scriviamo \hat{U}_β nella forma:

$$\hat{U}_\beta = (\hat{U}_\varepsilon)^n = \{\exp[-\varepsilon \hat{H}']\}^n$$

Dalla regola per il prodotto tra gli operatori (3.2.16) o (3.2.31) otteniamo per il kernel $U_\beta[z^*, z]$ la relazione:

$$(3.3.2) \quad U_\beta[\xi^*, \xi] = \int \frac{Dz_{n-1}^* Dz_{n-1}}{(2\pi i)^{1-\eta}} U_\varepsilon[\xi^*, z_{n-1}] \exp\{-\int z_{n-1}^* z_{n-1} dx\} \dots \\ \dots \frac{Dz_1^* Dz_1}{(2\pi i)^{1-\eta}} U_\varepsilon[z_2^*, z_1] \exp\{-\int z_1^* z_1 dx\} U_\varepsilon[z_1^*, \xi]$$

dove $\eta = 0$ per i bosoni e $\eta = 1$ per i fermioni. Sviluppando al primo ordine in ε e usando la (3.2.19) o la (3.2.30) otteniamo:

$$U_{\varepsilon N}[z^*, z] \approx 1 - \varepsilon H'[z^*, z] \approx \exp\{-\varepsilon \int h[z^*, z] dx\}$$

e quindi:

$$(3.3.3) \quad U_\varepsilon[z^*, z] \approx \exp\{\int dx (z^* z - h[z^*, z])\}$$

dove $h[z^*, z]$ e' la densita' dell'hamiltoniana scritta in forma normale. Sostituiamo ora la (3) nella (2); ponendo $z_n^* = \xi^*$ e $z_0 = \xi$ e riordinando i vari termini si ottiene in forma sintetica:

$$(3.3.4) \quad U_\beta[\xi^*, \xi] = \int Dz^* Dz / (2\pi i)^{1-\eta} \\ \exp\{\int dx (\sum_{k=1}^{n-1} (z_{k+1}^* - z_k^*) z_k + z_1^* z_0 - \varepsilon \sum_{k=0}^{n-1} h[z_{k+1}^*, z_k])\}$$

L'esponente dell'integrando a secondo membro della (4) al limite $\varepsilon \rightarrow 0$ diventa l'integrale tra 0 e β sul tempo immaginario τ , eccetto per la prima sommatoria che contiene solo $n-1$ addendi. Osserviamo tuttavia che:

$$\sum_{k=1}^{n-1} (z_{k+1}^* - z_k^*) z_k + z_1^* z_0 = \sum_{k=0}^{n-1} (z_{k+1}^* - z_k^*) z_k + z_0^* z_0 \\ = -\sum_{k=1}^n z_k^* (z_k - z_{k-1}) + z_0^* z_0$$

e quindi al limite $\varepsilon \rightarrow 0$ la (4) si trasforma nel seguente integrale funzionale condizionato:

$$(3.3.5) \quad U_\beta[\xi^*, \xi] = \int \frac{Dz^*(x, \tau) Dz(x, \tau)}{(2\pi i)^{1-\eta}} \\ \exp\{1/2 \int dx [z^*(x, 0) z(x, 0) + z^*(x, \beta) z(x, \beta)]\} \\ \exp\{\int dx \int_0^\beta d\tau [(z^* z - z^* \dot{z})/2 - h[z^*, z]]\}$$

con le condizioni $z(x, 0) = \xi(x)$ e $z^*(x, \beta) = \xi^*(x)$.

Usando la (3.2.20) o la (3.2.33) si ottiene la espressione cercata per la funzione di partizione:

$$(3.3.6) \quad Z = \int \frac{Dz^* Dz}{(2\pi i)^{1-\eta}} \exp\{\int dx \int_0^\beta d\tau [(z^* z - z^* \dot{z})/2 - h[z^*, z]]\}$$

con la condizione al contorno $z(x, 0) = (-1)^\eta [z^*(x, \beta)]$.

Concludiamo questo paragrafo ricordando che in meccanica quantistica si e' interessati al calcolo dell'operatore di evoluzione temporale:

$$\hat{U}(t''-t') = \exp[-i(t''-t')\hat{H}]$$

Il kernel di $\hat{U}(t''-t')$ si puo' ottenere dalla (5) con la semplice sostituzione $\beta \rightarrow it$ ricavando cosi':

$$U(t''-t'; \xi^*, \xi) = \int \frac{Dz^*(x,t) Dz(x,t)}{(2\pi i)^{1-\eta}}$$

$$(3.3.7) \quad \exp\left\{\int dx [z^*(x,t')z(x,t') + z^*(x,t'')z(x,t'')]/2\right\} \\ \exp\left\{i \int_{t'}^{t''} dx \int dt [(z^* \dot{z} - \dot{z}^* z)/2i - h[z^*, z]]\right\}$$

Le differenze tra la (7) e la formula di Feynman (1.2.3) sono solo di dettaglio. In effetti in entrambe le formule l'integrando e' $\exp\{i(\text{azione})\}$, e l'integrazione e' fatta sul prodotto delle misure dello spazio delle fasi. La (7) ha pero' in piu' nell'integrando il funzionale:

$$\exp\left\{1/2 \int dx [z^*(x,t')z(x,t') + z^*(x,t'')z(x,t'')]\right\}$$

che riflette la differenza nelle condizioni al contorno sulle "traiettorie" su cui si integra. Nella (1.2.3) sono fissati i valori della funzione $q(t)$ in t' e t'' , mentre nella (7) e' fissato il valore di $z^*(x,t)$ in $t=t''$, e quello di $z(x,t)$ e' fissato in $t=t'$.

3.4 CALCOLO DI Z PER BOSONI E FERMIONI LIBERI.

Calcoliamo come applicazione della formula (3.3.6) la funzione di partizione per sistemi non interagenti. Sia data l'hamiltoniana H' :

$$\hat{H}' = \sum_k \epsilon_k \hat{a}_k^+ \hat{a}_k$$

dove l'energia di particella singola ϵ_k e' misurata dal potenziale chimico μ . Sostituendo l'espressione esplicita dell'hamiltoniana nella (3.3.5) otteniamo per il kernel dell'operatore \hat{U}_ρ la relazione:

$$U_\rho[\xi^*, \xi] = \int \prod_k \frac{Dz_k^* Dz_k}{(2\pi i)^{1-\eta}}$$

$$(3.4.1) \quad \exp\left\{1/2 [z_k^*(\beta)z_k(\beta) + z_k^*(0)z_k(0)]\right\} \\ \exp\left\{\int_0^\beta d\tau [1/2 (\dot{z}_k^* z_k - z_k^* \dot{z}_k) - \epsilon_k z_k^* z_k]\right\}$$

con le condizioni $z_k^*(\beta) = \xi_k^*$ e $z_k(0) = \xi_k$.

Per completare il quadrato nel funzionale quadratico non uniforme ad esponente nell'integrando della (1), cerchiamo le "traiettorie" che lo estremizzano. Queste sono determinate dalle equazioni:

$$(3.4.2) \quad \dot{z}_k^* - \epsilon_k z_k^* = 0 \quad \text{e} \quad \dot{z}_k + \epsilon_k z_k = 0$$

con le condizioni iniziali $z_k^*(\beta) = \xi_k^*$ e $z_k(0) = \xi_k$, che hanno per soluzione le funzioni:

$$\bar{z}_k = \xi_k \exp\{-\epsilon_k \tau\} \quad \text{e} \quad \bar{z}_k^* = \xi_k^* \exp\{-(\beta-\tau)\epsilon_k\}$$

Ponendo nella (1) $z_k = z_k' + \bar{z}_k$ e $z_k^* = z_k'^* + \bar{z}_k^*$, otteniamo:

$$U_\rho[\xi^*, \xi] = \prod_k \exp\{-\xi_k^* \xi_k e^{-\beta \epsilon_k}\}$$

(3.4.3)

$$\int \frac{Dz_k^* Dz_k}{(2\pi i)^{1-N}} \exp\left\{ \int_0^\beta d\tau \left[(\dot{z}_k^* z_k - z_k^* \dot{z}_k) / 2 - \xi_k z_k^* z_k \right] \right\}$$

dove l'integrale funzionale rimasto, come si puo' verificare ritornando alla forma discreta dell'integrale stesso, e' uguale a 1. Utilizzando l'opportuna definizione di traccia (3.2.20) o (3.2.33), otteniamo le ben note espressioni della funzione di partizione Z sia per i bosoni che per i fermioni:

$$(3.4.4a) \quad Z = \int \prod_k \frac{d\xi_k^* d\xi_k}{2\pi i} \exp\{-\xi_k^* \xi_k (1 - e^{-\beta \xi_k})\}$$

$$= \prod_k (1 - \exp\{-\beta \xi_k\}) \quad (\text{bosoni})$$

$$(3.4.4b) \quad Z = \int \prod_k d\xi_k^* d\xi_k \exp\{-\xi_k^* \xi_k (1 + e^{-\beta \xi_k})\} =$$

$$= \prod_k (1 + \exp\{-\beta \xi_k\}) \quad (\text{fermioni})$$

CAPITOLO 4

IL FUNZIONALE GENERATORE

4.1 LA MATRICE S PER UN CAMPO BOSONICO

Avendo introdotto nei precedenti capitoli gli integrali di Feynman sia in meccanica quantistica che in meccanica statistica, vogliamo ora servirci di questa tecnica per descrivere le funzioni di Green di un sistema quantistico. In particolare il formalismo funzionale ci permette di descrivere, come vedremo, in forma compatta, l'intera gerarchia delle funzioni di Green. Tratteremo qui come esempio il caso di un campo bosonico autointeragente nel contesto della teoria quantistica dei campi. Di fatto l'estensione a qualunque caso pratico non presenta difficolta' rilevanti. Ricordiamo allora che un campo bosonico libero classico $\phi(x)$ ubbidisce all'equazione di Klein-Gordon

$$(4.1.1) \quad (\square + \mu^2) \phi(x) = 0$$

Le variabili canonicamente coniugate saranno $\phi(x)$ e $\pi(x) = \partial\phi(x)/\partial x_0$. Tali due campi si possono analizzare in termini delle loro componenti di Fourier:

$$(4.1.2a) \quad \phi(x) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int \frac{d^3 k}{\sqrt{2\omega_k}} \left[z_k^* e^{-ikx} + z_k e^{ikx} \right]$$

$$(4.1.2b) \quad \pi(x) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int d^3 k \, i \sqrt{\frac{\omega_k}{2}} \left[z_k^* e^{-ikx} - z_k e^{ikx} \right]$$

(abbiamo usato i simboli z e z^* , al posto dei piu' convenzionali a ed a^* , per mantenerci in stretta connessione con quanto detto nel precedente capitolo circa la rappresentazione olomorfa)

La quantizzazione poi come e' noto avviene reinterprestando le ampiezze z_k^* e z_k come operatori di creazione e distruzione ed imponendo le regole di commutazione canoniche. Le espressioni (2a) e (2b) sono pero' particolarmente convenienti per scrivere l'integrale funzionale, visto che le grandezze che compaiono all'esponente nell'integrale di Feynman sono sempre grandezze classiche.

L'hamiltoniana classica e' ovviamente, in termini delle ampiezze di Fourier,

$$(4.1.3) \quad H = \int d^3k \omega_k z_k^* z_k$$

Il problema che ci interessa ora e' quello di descrivere l'evoluzione temporale di un campo bosonico autointeragente, la cui hamiltoniana cioe' sia

$$(4.1.4) \quad \hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}[\hat{\phi}]$$

L'evolutore temporale in questo schema si scrive immediatamente in base a quanto visto nel capitolo precedente: basta usare le (2a), (2b) ed interpretare le variabili z, z^* come variabili di integrazione. Naturalmente anche in V il campo ϕ deve essere pensato come funzione di z, z^* . In questo modo applicando la relazione (3.3.7) al nostro caso si ha ad esempio (a meno cioe' di simmetrizzazioni)

$$(4.1.5) \quad U(z^*, z, t''-t') = \int \prod_k \frac{dz_k^*(t) dz_k(t)}{2\pi i} e^{\int d^3k z_k^*(t'') z_k(t')} e^{\int_{t'}^{t''} dt \{-iV(z^*, z) + i \int d^3k z_k^*(t) [i\partial_t - \omega_k] z_k(t)\}}$$

Sequendo la stessa tecnica illustrata nel capitolo precedente e' immediato determinare il kernel di \hat{U} nel caso libero:

$$(4.1.6) \quad U_0(z^*, z, t''-t') = \exp \left\{ z^* z e^{i\omega(t''-t')} \right\}$$

L'evoluzione di una qualunque funzione $f(z^*)$ rappresentativa del nostro sistema nello spazio di Bargmann-Fock sotto l'effetto dell'evolutore \hat{U}_0 e' semplice: scriviamo infatti esplicitamente l'evoluto di f

$$(U_0(t)f)(z^*) = \int \frac{dw^* dw}{2\pi i} \exp\{z^* w e^{i\omega t} - w^* w\} f(w^*) e^{-w^* w}$$

Da questa scrittura esplicita si vede come $U_0 f$ dipende funzionalmente da $z^* \exp(i\omega t)$. La forma funzionale e' poi bloccata dal fatto che per $t \rightarrow 0$ l'evolutore temporale deve tendere all'unita' e quindi la relazione precedente deve tendere alla identita' $f=f$. Di qui segue

$$(4.1.7) \quad (U_0(t)f)(z^*) = f(z^* e^{i\omega t})$$

La quantita' alla quale si e' interessati usualmente in teoria dei campi e' la matrice \hat{S} , che, in rappresentazione di Heisenberg, e' connessa all'evolutore temporale da

$$(4.1.8) \quad \hat{S} = \lim_{t'' \rightarrow \infty} \lim_{t' \rightarrow -\infty} e^{i\hat{H}_0 t''} U(t''-t') e^{-i\hat{H}_0 t'}$$

La (7) ci fornisce il modo di tenere in conto l'evoluzione libera indotta dagli $\exp\{i\hat{H}_0 t\}$: il kernel di \hat{S} nello spazio di Bargmann-Fock sarà

$$(4.1.9) \quad S(z_k^*, z_k) = \lim_{t'' \rightarrow \infty} \lim_{t' \rightarrow -\infty} U(z_k^* e^{i\omega_k t''}, z_k e^{-i\omega_k t'}, t''-t')$$

Simmetrizzando opportunamente l'espressione per il kernel di \hat{S} sarà

$$S(z_k^*, z_k) = \lim_{\substack{t'' \rightarrow \infty \\ t' \rightarrow -\infty}} \int \prod_{kt} \frac{dz_k^*(t) dz_k(t)}{2\pi i}$$

$$(4.1.10) \quad \exp\{1/2 \int d^3 k [z_k^*(t'') z_k(t'') + z_k^*(t') z_k(t')]\}$$

$$\exp\{i \int_{t'}^{t''} d^3 k \int dt [(z_k^*(t) \dot{z}_k(t) - \dot{z}_k^*(t) z_k(t)) / 2i$$

$$- \omega_k z_k^*(t) z_k(t) - V(z^*, z)]\}$$

con le condizioni al contorno

$$z_k(t') = z_k e^{-i\omega_k t'}$$

$$z_k^*(t'') = z_k^* e^{i\omega_k t''}$$

4.2 CAMPO BOSONICO INTERAGENTE CON UNA SORGENTE ESTERNA

Di nuovo questa espressione può essere calcolata esplicitamente se l'integrando ha all'esponente una forma quadratica non omogenea. L'unico caso pratico è quello di un accoppiamento lineare con una sorgente esterna classica, cioè

$$(4.2.1) \quad \hat{V}[\hat{\phi}] = \int d^3 x J(x) \hat{\phi}(x)$$

ove $J(x)$ è una sorgente del campo, in generale dipendente dal tempo, sulla quale richiediamo solo proprietà di regolarità ovvie (nemmeno particolarmente stringenti) e che si annulli sufficientemente in fretta per grandi tempi nel passato e nel futuro. Val la pena di sottolineare a questo punto che questo caso, oltre ad essere l'unico trattabile esattamente, non è semplicemente un caso accademico, ma è la base per dare uno sviluppo perturbativo di S con un potenziale generico.

In termini delle variabili olomorfe z^* e z il potenziale si riscrive come

$$(4.2.2) \quad V[z^*, z] = \int d^3 k [\gamma_k(t) z_k^* + \gamma_k^*(t) z_k]$$

ove naturalmente le $\gamma_k(t)$ sono le trasformate di Fourier della sorgente:

$$(4.2.3) \quad \gamma_k(t) = - \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \frac{1}{\sqrt{2\omega_k}} \int d^3 x e^{-ikx} J(x, t)$$

con definizione ovvia per la complessa coniugata.

Calcoliamo ora l'integrale funzionale con la regola già vista per gli integrali gaussiani, cercando cioè l'estremo dell'esponente. Questo equivale anzitutto a risolvere le equazioni del moto, che sono

$$(4.2.4a) \quad \dot{z}_k(t) + i\omega_k z_k(t) + i\gamma_k(t) = 0$$

$$(4.2.4b) \quad \dot{z}_k^*(t) - i\omega_k z_k^*(t) - i\gamma_k^*(t) = 0$$

con le condizioni al contorno

$$(4.2.5a) \quad z_k^*(t'') = z_k^* e^{i\omega_k t''}$$

$$(4.2.5b) \quad z_k(t') = z_k e^{-i\omega_k t'}$$

e, una volta risolte tali equazioni, nel calcolare l'azione lungo le traiettorie così ottenute (classiche). La matrice S sarà poi l'esponenziale dell'azione così calcolata. La soluzione delle equazioni del moto è banale e ricalca quanto già visto nel precedente capitolo:

$$(4.2.6a) \quad z_k^*(t) = z_k^* e^{i\omega_k t} - i e^{i\omega_k t} \int_t^{t''} e^{-i\omega_k s} \gamma_k^*(s) ds$$

$$(4.2.6b) \quad z_k(t) = z_k e^{-i\omega_k t} - i e^{-i\omega_k t} \int_{t'}^t e^{i\omega_k s} \gamma_k(s) ds$$

Sostituiamo ora tali espressioni nell'azione. Il kernel della matrice S risulterà essere

$$(4.2.7) \quad S(z^*, z) = \exp\left\{ \int d^3 k \left[z_k^* z_k + \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int_{-\infty}^{\infty} dt \int d^3 x \frac{1}{\sqrt{2\omega_k}} J(\mathbf{x}, t) \right. \right. \\ \left. \left. \left(z_k^* e^{i\omega_k t - i\mathbf{k}\mathbf{x}} + z_k e^{-i\omega_k t + i\mathbf{k}\mathbf{x}} \right) \right. \right. \\ \left. \left. - \frac{1}{(2\pi)^3} \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{\infty} dt \int_{-\infty}^{\infty} ds \int d^3 x \int d^3 y \frac{1}{2\omega_k} J(\mathbf{x}, t) J(\mathbf{y}, s) e^{i\mathbf{k}(\mathbf{x}-\mathbf{y}) - i\omega_k |t-s|} \right. \right. \\ \left. \left. \right\}$$

Il kernel normale semplicemente non conterrà il fattore $\int d^3 k z_k^* z_k$.

L'intera espressione è solo apparentemente complicata. Anzitutto introduciamo il campo classico

$$(4.2.8) \quad \varphi_0(\mathbf{x}) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \frac{d^3 k}{\sqrt{2\omega_k}} \left[z_k^* e^{i\mathbf{k}\mathbf{x}} + z_k e^{-i\mathbf{k}\mathbf{x}} \right]$$

che è manifestamente soluzione dell'equazione di Klein-Gordon libera. La conoscenza di tale campo è del tutto equivalente alla conoscenza delle condizioni al contorno. Le formule di inversione della (8) sono infatti ben note:

$$(4.2.9a) \quad z_k^* = i \int d^3 x e^{i\mathbf{k}\mathbf{x}} \overleftrightarrow{\partial}_t \varphi_0(\mathbf{x})$$

$$(4.2.9b) \quad z_k = -i \int d^3x e^{-ikx} \overleftrightarrow{\partial}_t \varphi_0(x)$$

ove il simbolo $\overleftrightarrow{\partial}$ e' definito da

$$u \overleftrightarrow{\partial} v = u(\partial v) - (\partial u)v$$

Riconosciamo poi che la funzione che compare nell'ultimo integrale doppio all'esponente e' il propagatore di un mesone libero:

$$(4.2.10) \quad D_0(x) = - \int \frac{d^3k}{2\omega_k} e^{ikx} e^{-i\omega_k x_0}$$

$$= - \frac{1}{(2\pi)^4} \int d^4k \frac{1}{k^2 + \mu^2 + i\eta} e^{-ikx}$$

Val la pena di osservare che per campi non interagenti ($V=0$)

$$(4.2.11) \quad D_0(x-y) = \langle 0 | T [\hat{\phi}(x), \hat{\phi}(y)] | 0 \rangle$$

Con tali definizioni il kernel normale di S assume la forma assai piu' semplice

$$(4.2.12) \quad S_N(z^*, z) = \exp \{ i \int dx J(x) \varphi_0(x) \}$$

$$\exp \{ i/2 \int dx \int dy J(x) D_0(x-y) J(y) \}$$

che e' l'espressione conclusiva di questo paragrafo.

4.3 IL CAMPO BOSONICO AUTOINTERAGENTE

L'espressione finale del paragrafo precedente ci permette di dare una soluzione formale al problema del campo bosonico interagente tramite un potenziale V, in altre parole di rielaborare l'equazione (4.1.10) trasformando l'integrale funzionale in derivate funzionali. L'intera procedura si basa su un trucco assai semplice: si osserva infatti che vale l'identita'

$$(4.3.1) \quad \varphi(x_1) \dots \varphi(x_n) =$$

$$\left. \frac{1}{i \delta J(x_1)} \dots \frac{1}{i \delta J(x_n)} e^{i \int dx \varphi(x) J(x)} \right|_{J=0}$$

Di qui segue che qualunque funzionale di φ che si possa sviluppare in serie di Volterra (l'analogo della serie di Taylor per i funzionali) e' esprimibile come somma di derivate agenti su $\exp[iJ\varphi]$. La (4.3.1) si generalizza cioe' alla identita'

$$(4.3.2) \quad F[\varphi] = F \left[-i \frac{\delta}{\delta J} \right] e^{i \int dx \varphi(x) J(x)} \Big|_{J=0}$$

e nel caso che ci interessa in pratica, visto che c'è dentro l'integrale funzionale, nell'azione classica, un potenziale V che dipende funzionalmente da φ ,

$$\begin{aligned} \exp\{-i \int V(\varphi) dx\} = \\ (4.3.3) \\ = \exp\{-i \int dx V(-i \delta / \delta J)\} \exp\{i \int dx \varphi(x) J(x)\} \end{aligned}$$

Non rimane dunque che aggiungere dentro all'integrale funzionale un termine $\exp\{iJ\varphi\}$, cioè un accoppiamento con una sorgente esterna, proprio come quello descritto nel precedente paragrafo, fare i conti e alla fine porre la sorgente uguale a 0. In questo modo il potenziale si riscrive non più come funzionale di φ , ma come operatore derivativo su $\exp\{iJ\varphi\}$. Ora, le $\varphi(x)$ sono variabili di integrazione, mentre le sorgenti esterne sono per così dire dati del problema, che possiamo maneggiare a nostro piacere. Possiamo (se non vogliamo scendere in dettagli matematici cui accenneremo in seguito) portar fuori dall'integrale funzionale l'operatore derivativo $\exp\{-iV(\delta / \delta J)\}$ e l'integrale funzionale che resta è proprio quello descritto nel paragrafo precedente. Usando perciò l'espressione (4.2.12) si può riscrivere S nella forma

$$\begin{aligned} S_N[\varphi_0] = \exp\{-i \int dx V[-i \delta / \delta J]\} \\ (4.3.4) \\ \exp\{i \int J(x) \varphi_0(x) dx\} \exp\{i/2 \int dx dy J(x) D_0(x-y) J(y)\} \end{aligned}$$

in cui gli integrali sono stati calcolati tutti ed in cambio ci troviamo a dover calcolare solo derivate funzionali. È chiaro già da come è stata derivata che l'espressione $\exp\{-i V[\delta / \delta J]\}$ non è significativa di per sé, ma che è definita in termini del suo sviluppo in serie, e che ogni termine di tale sviluppo è ad un ordine ben definito in V . Ci rendiamo conto pertanto che l'espressione (4) è una espressione formale per descrivere a tutti gli ordini, in forma compatta, la teoria delle perturbazioni. Le espressioni (4.1.10) e (4) ci dicono però qualcosa di più: di fatto per ottenere la (4) sono stati fatti alcuni passaggi formali quantomeno dubbi, mentre la (4.1.10) ha un significato matematico ben preciso (almeno nella versione euclidea della teoria, cioè in termini di misura di Wiener). La validità della teoria delle perturbazioni (in pratica la convergenza della serie perturbativa) è dunque ricondotta alla validità dei passaggi matematici fatti. In particolare il passaggio più dubbio è stato quello di scambiare uno sviluppo in serie con un integrale (funzionale per di più, ma non è questo il punto rilevante). Riducendo il problema alla sua forma più elementare si può considerare un integrale in una dimensione ed un potenziale del tipo

$$V = \lambda \varphi^4$$

(Ovviamente la forma più semplice: un termine quadratico non ci può essere perché sarebbe già inglobato nella massa, mentre un termine cubico renderebbe instabile la teoria). Mettendoci in una teoria euclidea l'integrale che ci interessa avrà la forma

$$(4.3.5) \quad \int d\varphi \exp\{-\alpha \varphi^2 + \lambda \varphi^4 + J\varphi\}$$

e il passaggio matematico discutibile consiste nello sviluppare in serie $\exp\{\lambda \varphi^4\}$ e scambiare la serie con l'integrale:

$$\int d\varphi \sum_n \frac{\lambda^n}{n!} \varphi^{4n} \exp\{-\alpha \varphi^2 + J\varphi\} = \sum_n \frac{\lambda^n}{n!} \left(\frac{\delta^n}{\delta J^n} \right) \int d\varphi \exp\{-\alpha \varphi^2 + J\varphi\}$$

Ora che questo passaggio sia sbagliato è ovvio, perché è proprio

$\exp\{\lambda \varphi^4\}$ il termine che domina la convergenza dell'integrale: per $\lambda < 0$ l'integrale e' convergente, mentre viceversa diverge. Dunque $\lambda = 0$ e' certamente un punto singolare e non ha senso uno sviluppo in serie intorno a tale punto. Un esame piu' dettagliato mostrera' (e questo si vedra' in seguito) che la serie perturbativa ha senso in realta' come serie asintotica.

4.4 LA FORMULA DI RIDUZIONE

Nel paragrafo precedente si e' visto come il kernel normale della matrice S si possa esprimere come funzionale di un campo classico che contiene le informazioni sulle condizioni al contorno. Va da se' che, in quanto funzionale di φ_0 , S si puo' esprimere mediante la sua serie di Volterra: si puo' cioe' scrivere

$$(4.4.1) \quad S[\varphi_0] = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \int dx_1 \dots dx_n S_n(x_1, \dots, x_n) \varphi_0(x_1) \dots \varphi_0(x_n)$$

essendo chiaro che il termine con indice n descrive lo scattering con n particelle tra entranti ed uscenti. E' chiaro che sono le S_n le quantita' che hanno interesse fisico immediato, essendo connesse (a meno di un modulo quadro e di un fattore di spazio fasi) alle sezioni d'urto.

Le stesse informazioni contenute nelle S_n sono contenute in un altro oggetto, detto usualmente 'funzionale generatore', che e' la quantita' centrale di ogni teoria di campo. Per arrivare a definirlo estendiamo anzitutto la definizione del funzionale $S[\varphi_0]$. Questo e' stato calcolato, ad es. nella (4.3.4) mediante il trucco di introdurre una sorgente esterna J che poi veniva messa a 0 alla fine del calcolo. E' evidente che si puo' estendere la definizione di S al caso in cui questa sorgente rimanga comunque finita, cioe'

$$(4.4.2) \quad S_n[\varphi_0, J] = \exp\{-i \int V[-i \delta / \delta J] dx\} \exp\{i \int J(x) \varphi_0(x) dx\} \exp\{i/2 \int dx dy J(x) D_0(x-y) J(y)\}$$

Definiamo il funzionale generatore come il limite dell'espressione precedente per φ_0 (e non J) $\rightarrow 0$:

$$(4.4.3) \quad Z[J] = S[\varphi_0, J] \Big|_{\varphi_0}$$

Anche Z , come gia' S , puo' essere convenientemente espresso in termini della sua serie di Volterra:

$$(4.4.4) \quad Z[J] = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \int dx_1 \dots dx_n G_n(x_1, \dots, x_n) J(x_1) \dots J(x_n)$$

Il significato fisico di Z e delle funzioni G_n cosi' introdotte sara' discusso nel paragrafo successivo. Ora vogliamo mostrare che la conoscenza di Z implica la conoscenza di S . Per fare questo diamo una estensione del funzionale S , $S[\varphi_0] \rightarrow \tilde{S}[\varphi]$, facendo variare φ su tutto lo spazio funzionale e non restringendolo ad essere soluzione dell'equazione di Klein-Gordon:

$$(4.4.5) \quad \tilde{S}[\varphi] = \exp\{-i \int dx V[-i \delta / \delta J]\}$$

$$\exp\{i \int dx \varphi(x) J(x)\} \exp\{i/2 \int dx \int dy J(x) D_0(x-y) J(y)\}$$

Ovviamente anche \tilde{S} puo' essere sviluppata in serie di Volterra e i coefficienti saranno

$$(4.4.6) \quad i^n S_n(x_1, \dots, x_n) = \frac{\delta}{\delta \varphi(x_1)} \dots \frac{\delta}{\delta \varphi(x_n)} \tilde{S}[\varphi] \Big|_{\varphi=0}$$

Naturalmente i coefficienti dello sviluppo di S e di \tilde{S} dovranno coincidere, visto che S si ottiene restringendo lo spazio funzionale su cui variano le φ e che quindi in tale spazio di due oggetti devono coincidere.

Consideriamo ora la (5) e calcoliamo esplicitamente le derivate funzionali. E' chiaro che ogni derivata rispetto a φ porterà un J a fattore:

$$(4.4.7) \quad S_n(x_1, \dots, x_n) = (-i)^n \frac{\delta}{\delta \varphi(x_1)} \dots \frac{\delta}{\delta \varphi(x_n)} \tilde{S}[\varphi] \Big|_{\varphi=0} =$$

$$e^{-i \int dx \varphi(x) J(x)} \frac{i/2 \int dx \int dy J(x) D_0(x-y) J(y)}{J(x_1) \dots J(x_n)} \Big|_{\varphi=0}$$

(ove naturalmente l'espressione $\int dx \int dy J(x) D_0(x-y) J(y)$ sottintende le integrazioni).

A parte definiamo

$$(4.4.8) \quad \tilde{J}(x) = \int dy D_0(x-y) J(y)$$

E' chiaro che \tilde{J} dipende funzionalmente (per quanto in maniera ingenua) da J . Vediamo ora che derivando Z rispetto a \tilde{J} troviamo una connessione con le S_n . Osserviamo anzitutto le derivate funzionali rispetto a \tilde{J} commutano con le derivate rispetto a J . Questo e' ovvio perche'

$$(4.4.9) \quad \frac{\delta}{\delta \tilde{J}(x)} = \int dy \frac{\delta J(y)}{\delta \tilde{J}(x)} \frac{\delta}{\delta J(y)}$$

ed invertendo la (8) si ha simbolicamente

$$(4.4.10) \quad \frac{\delta}{\delta \tilde{J}} = D_0^{-1} \frac{\delta}{\delta J}$$

Sfruttando il fatto che le derivate in (10) commutano tra di loro troviamo

$$(-i)^n \frac{\delta}{\delta \tilde{J}(x_1)} \dots \frac{\delta}{\delta \tilde{J}(x_n)} Z[J] \Big|_{\varphi=0} =$$

$$= e^{-i \int dx \varphi(x) J(x)} (-i)^n \frac{\delta}{\delta \tilde{J}(x_1)} \dots \frac{\delta}{\delta \tilde{J}(x_n)} e^{i/2 \int dx \int dy J(x) D_0(x-y) J(y)} \Big|_{\varphi=0}$$

ma usando la (10)

$$-i \frac{\delta}{\delta \tilde{J}} e^{i/2 \int dx \int dy J(x) D_0(x-y) J(y)} = -i \frac{\delta}{\delta J} e^{i/2 \int dx \int dy J(x) D_0(x-y) J(y)} \frac{\delta J}{\delta \tilde{J}}$$

$$= (-i) i D_0 J e^{i/2 \int dx \int dy J(x) D_0(x-y) J(y)} D_0^{-1} = J e^{i/2 \int dx \int dy J(x) D_0(x-y) J(y)}$$

e utilizzando questa relazione un numero sufficiente di volte si ottiene

$$\begin{aligned}
 & (-i)^n \frac{\delta}{\delta \tilde{J}(x_1)} \dots \frac{\delta}{\delta J(x_n)} Z[J] \Big|_{J=0} = \\
 (4.4.11) \quad & = e^{-i \int dx V[-i\delta / \delta J]} J(x_1) \dots J(x_n) e^{i/2[J D_0 J]} \Big|_{J=0}
 \end{aligned}$$

Ora si riconosce che l'espressione così ottenuta non è altro che $S_n(x_1, \dots, x_n)$. Restano solo da sostituire le derivate rispetto a \tilde{J} con quelle rispetto a J , ma come si è visto questo comporta solo moltiplicare per un fattore D_0^{-1} . L'ultimo passo è riconoscere che se D_0 è l'inverso dell'operatore di Klein-Gordon, D_0^{-1} non sarà altro che l'operatore di Klein-Gordon stesso. Allora da un lato il primo membro della (11) non sarà altro che

$$\begin{aligned}
 & (\square_{x_1} + \mu^2) \dots (\square_{x_n} + \mu^2) (-i)^n \frac{\delta}{\delta J(x_1)} \dots \frac{\delta}{\delta J(x_n)} Z[J] \Big|_{J=0} = \\
 & = (\square_{x_1} + \mu^2) \dots (\square_{x_n} + \mu^2) G_n(x_1, \dots, x_n)
 \end{aligned}$$

mentre il secondo membro come detto è S_n . Abbiamo perciò ottenuto una relazione tra le S_n e le G_n , che ci permette di scrivere la matrice S nella forma

$$\begin{aligned}
 S &= \sum_n \frac{1}{n!} \int dx_1 \dots dx_n \varphi_0(x_1) \dots \varphi_0(x_n) S_n(x_1, \dots, x_n) = \\
 (4.4.12) \quad & = \sum_n \frac{1}{n!} \int dx_1 \dots dx_n \varphi_0(x_1) \dots \varphi_0(x_n) \\
 & \quad (\square_{x_1} + \mu^2) \dots (\square_{x_n} + \mu^2) G_n(x_1, \dots, x_n)
 \end{aligned}$$

Tale formula è centrale nella teoria dei campi, e prende il nome di **formula di riduzione**. Il suo significato fisico però al momento non è apparente, perché ancora non abbiamo discusso che cosa sono gli oggetti che compaiono nello sviluppo di Z . Per il momento ciò che è chiaro è che noto Z si può conoscere S tramite la formula di riduzione, ma che Z contiene qualche cosa di più, perché rispetto ad S non ha il vincolo di dipendere funzionalmente da una soluzione dell'equazione di campo libera. In altre parole conoscere Z corrisponde a conoscere S , che è una estensione di S . Come apparirà più chiaro in seguito S contiene solo informazioni su processi on-shell, mentre Z contiene anche le estensioni off-shell.

4.5 IL FUNZIONALE GENERATORE

In questo paragrafo vogliamo studiare in dettaglio chi è il funzionale Z precedentemente introdotto. Il procedimento che ci ha portato

a definirlo si puo' schematizzare in tre punti

i) Siamo partiti da una hamiltoniana $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}$ e abbiamo costruito il nucleo normale della matrice $\hat{S}: S_N[\varphi_0]$

ii) Abbiamo generalizzato l'hamiltoniana introducendo un accoppiamento con una sorgente esterna di bosoni:

$$(4.5.1) \quad \hat{H} \rightarrow \hat{H}_J = \hat{H} + \int d^3x J(x) \hat{\phi}(x)$$

costruendo l'ovvia estensione della matrice S: $S[\varphi_0, J]$.

iii) Abbiamo scelto le condizioni al contorno $\varphi_0 = 0$

$$Z[J] = S_N[\varphi_0, J] \Big|_{\varphi_0=0}$$

Ricordiamo ora come si descrive uno stato in rappresentazione olomorfa: sappiamo che le componenti di uno stato a n particelle (con impulso dato) sono date dai coefficienti di Taylor di ordine n, mentre la componente a 0 particelle (vuoto o stato fondamentale che dir si voglia) e' ottenuto dal valore della funzione nell'origine. Dunque il porre a zero φ_0 e' palesemente equivalente al porre a zero z e \bar{z} , e quindi a calcolare l'elemento di matrice dell'evolvente temporale $U(-\infty, \infty)$ sul vuoto. Questo modo di descrivere la situazione e' pero' suscettibile di indurre in errore: e' chiaro infatti che in rappresentazione di Heisenberg uno stato non si evolve nel tempo, **purché H non dipenda dal tempo**. Nel caso che stiamo studiando tuttavia l'hamiltoniana totale dipende dal tempo attraverso J. In altre parole non abbiamo a che fare con un operatore, ma con una famiglia di operatori parametrizzati da t, e che hanno la caratteristica, in generale, di non commutare, ossia

$$(4.5.2) \quad [H_J(t), H_J(t')] \neq 0$$

Ne segue che ad ogni $H_J(t)$ corrispondera' uno stato fondamentale anch'esso parametrizzato da t, in generale diverso per ogni t. Ovviamente si e' detto che J(x) deve annullarsi per grandi tempi nel passato e nel futuro, e di conseguenza per $t \rightarrow \pm \infty$ lo stato fondamentale di $H_J(t)$ tendera' ad uno stato fondamentale di \hat{H} . Il punto cruciale e' che a questo punto i due stati $|0, t = -\infty\rangle$ e $|0, t = \infty\rangle$ essendo entrambi autostati di \hat{H} , dovranno coincidere a meno di una fase. Tornando dunque a Z, se definiamo

$$|0, t = -\infty\rangle = |0 \text{ in}\rangle$$

$$|0, t = \infty\rangle = |0 \text{ out}\rangle$$

e' chiaro che il funzionale Z altro non e' che la fase in questione:

$$(4.5.3) \quad Z[J] = \langle 0 \text{ out} | 0 \text{ in} \rangle$$

dal che consegue tra l'altro che

$$(4.5.4) \quad Z[J] \Big|_{J=0} = 1$$

Avendo stabilito questo risultato fondamentale, ci chiediamo cosa sono le derivate funzionali di Z[J]. Partiamo ad esempio dal calcolo di $\delta Z[J] / \delta J(x)$. Per far questo spezziamo l'evolvente temporale in 3 pezzi: prima l'evolvente da $-\infty$ a $t - \xi/2$ ($t = x_0$), poi da $t - \xi/2$ a $t + \xi/2$ e infine da $t + \xi/2$ a ∞ . In questo modo solo il secondo e' toccato dalla derivata funzionale, pero' in compenso l'intervallo sara' scelto infinitesimo. Vale l'identita'

$$Z[J] = \int \frac{dz^* dz}{2\pi i} \frac{d\bar{w}^* d\bar{w}}{2\pi i} U(0, z^*, \infty - (t + \xi/2)) e^{-zz^*}$$

$$U(z^*, w, \xi) e^{ww^*} U(w, 0, t - \xi/2 - (-\infty))$$

ove si sottintendono le somme su k : $zz^* \equiv \sum_k z_k^* z_k$. Dopo di ciò osserviamo che

$$U(z^*, w, \xi) = \exp\{z^* w - ih(z^*, w)\xi + iJ \varphi \cdot \xi\}$$

ove naturalmente J e φ vanno pensate come espresse in termini di z^* e w . La derivata funzionale ora ci porta semplicemente un $i\varphi(x, t)$ a fattore; poi il limite $\xi \rightarrow 0$ riduce $U(z^*, w, \xi)$ al semplice $\exp\{z^* w\}$:

$$\frac{\delta Z[J]}{\delta J(x)} = \int \frac{dz^* dz}{2\pi i} \frac{dw^* dw}{2\pi i} U(0, z, \infty - t) e^{-zz^*} \varphi(x, t)$$

(4.5.5)

$$e^{z^* w} U(w^*, 0, t + \infty)$$

Ripetiamo che $\varphi(x)$ va pensato in termini delle z^* e w , come da equazione (4.1.2), e che scritto così $\varphi(x)$ altro non è che il nucleo normale dell'operatore di campo $\hat{\phi}$. Il nucleo di $\hat{\phi}$ sarà allora il nucleo normale moltiplicato per $\exp\{z^* w\}$. La (5) può ora essere letta in termini di operatori come

$$\frac{\delta Z[J]}{\delta J(x)} = i \langle 0 \text{ out} | U(\infty - t) \hat{\phi}(x) U(t + \infty) | 0 \text{ in} \rangle$$

(4.5.6)

risultato che assume una forma ancora più semplice nel limite $J=0$:

$$\frac{\delta Z[J]}{\delta J(x)} \Big|_{J=0} = i \langle 0 | \hat{\phi}(x) | 0 \rangle$$

(4.5.7)

In altre parole la derivata funzionale di Z a $J=0$, primo coefficiente dello sviluppo di Volterra di Z , altro non è che il valor medio del campo $\hat{\phi}$ sul vuoto.

La procedura per ottenere le derivate successive è esattamente identica a questa, ma c'è un particolare che val la pena di osservare: se vogliamo studiare la derivata seconda, ad esempio, ai tempi t' e t'' , occorrerà spezzare U in più pezzi, prima da $-\infty$ al più piccolo tra t' e t'' , poi dal più piccolo al più grande dei due tempi, e poi da questo a ∞ . In questo modo si trova una espressione analoga alla (7), con due operatori di campo, ma ordinati in modo che quello a tempi minori stia sempre a destra (ordinamento temporale degli operatori). Si ottiene cioè

$$\frac{\delta^2 Z[J]}{\delta J(x) \delta J(y)} \Big|_{J=0} = i^2 \langle 0 | T[\hat{\phi}(x), \hat{\phi}(y)] | 0 \rangle$$

(4.5.8)

La generalizzazione ad ordini superiori è ovvia.

È chiaro ora che le grandezze così calcolate sono le G_n dello sviluppo di Volterra del funzionale generatore, ma soprattutto dalla (8) riconosciamo che queste sono anche le funzioni di Green del sistema. Dunque la conoscenza di Z è del tutto equivalente alla conoscenza di tutte le funzioni di Green. La formula di riduzione (4.4.12) dedotta nel paragrafo precedente acquista ora tutt'altra rilevanza, in quanto mostra la connessione tra la matrice S e le funzioni di Green, che ora diventano gli

oggetti centrali della teoria. E' chiaro poi perche' Z contenga piu' informazioni di S: infatti le funzioni di Green, se pensate in trasformata di Fourier, sono oggetti definiti per qualunque k e ω , e non necessariamente per $\omega^2 = k^2 + \mu^2$, (sono cioe' definite off-mass-shell), mentre proprio la formula di riduzione mostra che solo i loro valori on-shell ($\omega^2 = \mu^2 + k^2$) intervengono in S.

CAPITOLO 5

IL POLARONE - METODI TRADIZIONALI

5.1 GENERALITA', PARAMETRI FISICI E COSTANTE DI ACCOPPIAMENTO [1].

Si consideri un elettrone nella banda di conduzione di un cristallo ionico. Il campo elettrico dell'elettrone polarizza, e quindi distorce, il reticolo degli ioni nelle sue vicinanze. Il campo di polarizzazione cosi' creato interagisce a sua volta con l'elettrone abbassandone l'energia ed influenzandone il moto. L'elettrone piu' la deformazione del reticolo che lo accompagna nel suo moto possono venire pensati come un'unica quasi-particella, detta **polarone**, la cui massa efficace sara' maggiore di quella dell'elettrone nudo (eventualmente gia' modificata dal campo di Bloch del reticolo statico).

Ricordiamo ora le relazioni che legano i tre campi vettoriali D , E e P^{tot} che intervengono nella descrizione di un dielettrico:

$$(5.1.1) \quad D = \epsilon E$$
$$P^{tot} = \frac{1}{4\pi} (D - E) = \frac{1}{4\pi} \left(1 - \frac{1}{\epsilon}\right) D$$

relazioni che valgono per un solido isotropo o a simmetria cubica; ϵ rappresenta la costante dielettrica (in generale dipendente dalla frequenza) e P^{tot} il vettore di polarizzazione elettrica complessivo. In un cristallo ionico P^{tot} conterra' un contributo elettronico P dovuto alla polarizzazione elettronica degli ioni e un contributo vibrazionale P dovuto agli spostamenti relativi degli ioni:

$$(5.1.2) \quad P^{tot} = P^{el} + P = \frac{1}{4\pi} \left(1 - \frac{1}{\epsilon}\right) D$$

Il termine P^{el} non ci interessa qui, perche' di esso si puo' tenere conto includendolo nel potenziale cristallino medio che descrive l'interazione fra l'elettrone e il reticolo rigido. Notiamo che a P^{el} e a P

[1] Per questo capitolo si vedano ad esempio le seguenti referenze:

1. H. Frohlich, in "Polarons and Excitons" pag. 1, edito da C. G. Kuper e G. D. Whitfield, Plenum Press, New York, 1962
2. J. Appel, Solid State Physics, 21(1968)193.

corrispondono due anomalie dielettriche in regioni completamente separate dello spettro (tipicamente nell'infrarosso per P e nel visibile o nell'ultravioletto per P^{el}); in un range di frequenze intermedio si potrà supporre $P = 0$ e dalla (2) otteniamo

$$(5.1.3) \quad P^{el} = \frac{1}{4\pi} \left(1 - \frac{1}{\epsilon^\infty}\right) D$$

dove si è indicato con ϵ^∞ il valore della costante dielettrica (associata alla sola polarizzazione elettronica), che in tale range di frequenza può con buona approssimazione ritenersi costante ed uguale al suo valore statico.

Sottraendo la (3) (scritta per $\omega \rightarrow 0$) dalla (2) otteniamo

$$(5.1.4) \quad P = \frac{1}{4\pi\epsilon^*} D$$

dove la quantità ϵ^* definita dalla relazione

$$(5.1.5) \quad \frac{1}{\epsilon^*} = \frac{1}{\epsilon^\infty} - \frac{1}{\epsilon}$$

giuoca il ruolo di costante dielettrica efficace, associata alla sola polarizzazione vibrazionale. Cerchiamo ora di determinare il parametro che descrive l'accoppiamento tra l'elettrone e i modi normali associati alla polarizzazione del reticolo (fononi ottici). Se l'elettrone viene descritto come un pacchetto d'onde di estensione

$$(5.1.6) \quad \Delta x \sim \ell$$

l'indeterminazione nella velocità dell'elettrone sarà data da

$$(5.1.7) \quad \Delta v = \frac{1}{m} \Delta p \sim \frac{\hbar}{m\ell}$$

Potremo pertanto definire un tempo caratteristico elettronico

$$(5.1.8) \quad t_{el} \sim \frac{\ell}{\Delta v} \sim \frac{m\ell^2}{\hbar}$$

che dovrà venire confrontato col tempo caratteristico delle vibrazioni reticolari

$$(5.1.9) \quad T \sim \frac{1}{\omega_0}$$

dove ω_0 è la frequenza di tali vibrazioni. Confrontando i due tempi caratteristici t_{el} e T possono presentarsi due differenti situazioni:

a) $t_{el} \ll T$.

In questo caso gli ioni del reticolo durante il loro moto vedono solo la media temporale della distribuzione di carica corrispondente al pacchetto d'onde elettronico. Tale media temporale equivale a una distribuzione di carica statica, che determina una polarizzazione statica del reticolo. Siamo quindi ricondotti al problema di una distribuzione di carica di estensione ℓ immersa in un mezzo dielettrico di costante dielettrica ϵ^* ,

la cui energia potenziale vale approssimativamente

$$(5.1.10) \quad U \sim - \frac{e^2}{\xi^* \ell}$$

L'energia cinetica dell'elettrone sara' di ordine

$$(5.1.11) \quad K \sim \frac{\hbar^2}{2m \ell^2}$$

e la sua energia totale vale percio' approssimativamente

$$(5.1.12) \quad E = K + U \sim \frac{\hbar^2}{2m \ell^2} - \frac{e^2}{\xi^* \ell}$$

Minimizzando la (12) rispetto a ℓ si trova subito

$$(5.1.13) \quad \ell = \ell_{\text{opt}} = \xi^* a_0$$

$$(5.1.14) \quad E \cong - \frac{e^2}{2 \xi^* \ell_{\text{opt}}} = - \frac{e^2}{2 \xi^* a_0}$$

dove $a_0 = \hbar^2 / m e^2$ e' il raggio di Bohr.

Ricordiamo che i risultati appena ottenuti valgono solo per $t_{el} \ll \frac{1}{\omega_0}$; dalla (13), (14) otteniamo

$$(5.1.15) \quad \Delta v \cong \frac{\hbar}{m \ell_{\text{opt}}} = \frac{\hbar}{m \xi^* a_0}$$

$$t_{el} \cong \frac{\ell_{\text{opt}}}{\Delta v} \sim \frac{m \ell_{\text{opt}}^2}{\hbar} = \frac{m \xi^{*2} a_0^2}{\hbar}$$

La condizione di validita' per le (13), (14) e' pertanto

$$(5.1.16) \quad t_{el} \sim \frac{m \ell_{\text{opt}}^2}{\hbar} \ll \frac{1}{\omega_0}$$

cioe' anche

$$(5.1.17) \quad 2 \alpha^2 \gg 1$$

ove si e' introdotto il parametro adimensionale

$$(5.1.18) \quad \alpha = \frac{e^2}{\xi^*} \sqrt{\frac{m}{2 \hbar^3 \omega_0}}$$

che fornisce una misura dell'intensita' dell'accoppiamento fra l'elettrone e la polarizzazione del reticolo. La costante α riveste un ruolo centrale in tutta la teoria del polarone; notare che la (14) e' anche

$$(5.1.19) \quad E = - \alpha^2 \hbar \omega_0$$

Tutti i risultati appena ottenuti, e in particolare la (19), valgono dunque

nel limite $\alpha \gg 1$.

b) $t_{el} \gg T$.

Qui l'approssimazione statica utilizzata nel caso precedente non sarà più valida. Infatti ora gli ioni hanno il tempo di seguire il moto dell'elettrone, che risulterà dinamicamente correlato al moto degli ioni. In prima approssimazione potremo ancora supporre che l'energia di legame dell'elettrone sia della forma (14)

$$(5.1.20) \quad E \approx - \frac{e^2}{2 \epsilon^* l_{el}}$$

dove però l_{el} non è più determinato dalla condizione di minimizzazione della (12), ma può venire stimato assumendo che il moto elettronico e il moto ionico, essendo dinamicamente correlati, abbiano scale di tempi confrontabili. Avremo perciò

$$(5.1.21) \quad t_{el} \approx \frac{l_{el}}{\Delta v} \approx T$$

e questo, insieme al principio di indeterminazione $v \approx \hbar / (m l_{el})$, porta a

$$(5.1.22) \quad l_{el} \approx \sqrt{\frac{\hbar}{m \omega_0}}$$

Sostituendo la (22) nella (20) otteniamo, nel limite $\alpha \lesssim 1$,

$$(5.1.23) \quad E \approx - \hbar \omega_0 \frac{\alpha}{\sqrt{2}}$$

Le nostre valutazioni approssimate ci portano dunque a prevedere per l'energia di legame una dipendenza lineare da α [eq. (23)] nel regime di accoppiamento $\alpha \lesssim 1$, e una dipendenza quadratica da α [eq. (19)] nel regime di accoppiamento forte $\alpha \gg 1$. Come si vedrà nel seguito questa conclusione risulta confermata dai risultati di calcoli molto più dettagliati e precisi.

5.2 DERIVAZIONE DELL'HAMILTONIANA.

Approssimeremo il reticolo cristallino in cui si muove l'elettrone come un dielettrico continuo e isotropo. Tale schematizzazione sarà consentita purché la dimensione l del polarone introdotta nel paragrafo 5.1 sia grande rispetto al passo reticolare (limite del "large polaron").

Come già sappiamo il campo elettrico dell'elettrone determina una polarizzazione $P(r)$ nel mezzo; decomporremo il vettore P in una parte longitudinale ed in una parte trasversale:

$$(5.2.1) \quad P = P^{long} + P^{tr}$$

che soddisfano rispettivamente alle condizioni $\nabla \times P^{long} = 0$ e $\nabla \cdot P^{tr} = 0$; la decomposizione (1) è notoriamente unica [2]. Come si vedrà tra breve la parte trasversale di P non interviene nel termine di interazione con la carica elettronica, e potremo quindi d'ora in poi trascurare di considerarla.

L'energia intrinsecamente associata alla parte longitudinale della polarizzazione del mezzo in condizioni statiche ed in approssimazione armonica puo' essere scritta nella forma [3]

$$(5.2.2) \quad U = \frac{\gamma}{2} \int (P^{l\omega})^2 dr$$

ove γ e' una costante che verra' determinata nel seguito. In condizioni dinamiche dovremo sommare alla (2) un termine di energia cinetica associato al moto degli ioni

$$(5.2.3) \quad K = \frac{\gamma}{2\omega_0^2} \int (\dot{P}^{l\omega})^2 dr$$

dove ω_0 deve essere identificata con la frequenza delle vibrazioni ottiche longitudinali del reticolo (di cui trascuriamo la dispersione).

La densita' di energia di interazione fra la polarizzazione $P(r)$ nel punto r e la carica elettronica $-e$ situata in r_{el} sara' data da

$$(5.2.4) \quad v(r) = -e P(r) \nabla \cdot (1/|r-r_{el}|) = -P(r) \cdot D(r)$$

dove

$$(5.2.5) \quad D(r) = -e[-\nabla(1/|r-r_{el}|)]$$

e' il vettore spostamento elettrico prodotto dall'elettrone in r . L'energia di interazione complessiva vale quindi

$$(5.2.6) \quad V = -\int dr P \cdot D = -e \int dr P(r) \cdot \nabla [1/|r-r_{el}|] = \\ = -e \left[\int dr \nabla \cdot (P/|r-r_{el}|) - \int dr 1/|r-r_{el}| (\nabla \cdot P) \right]$$

Il primo termine a secondo membro della (6) e' l'integrale della divergenza di una quantita' che si annulla all' infinito piu' rapidamente di $1/r$ ed e' percio' nullo. Otteniamo quindi

$$(5.2.7) \quad V = e \int dr 1/|r-r_{el}| (\nabla \cdot P)$$

Dalla (7) segue subito che solo la parte longitudinale di P interviene in V , come gia' avevamo anticipato. Dalle equazioni (2), (3) e (4) segue che la Lagrangiana del sistema e' data da

$$(5.2.8) \quad L = \int dr \mathcal{L} = \frac{\gamma}{2\omega_0^2} \int dr (\dot{P}^2 - \omega_0^2 P^2) + \int dr P \cdot D$$

dove si e' posto, per brevitaa', $P = P^{l\omega}$, notazione che continueremo ad utilizzare anche nel seguito. Dalla (8) si ottengono le equazioni di Lagrange

[2] Vedi ad es. P. M. Morse e H. Feshbach, "Methods of Theoretical Physics" McGraw-Hill (1953) cap. I.

[3] H. Frohlich, in "Polarons and Excitons", (edito da C. G. Kuper e G. D. Withfield) pag. 1, Plenum Press, New York 1962. Vedi anche H. Frohlich, Adv. in Phys. 3(1954)325.

$$(5.2.9) \quad -\frac{\gamma}{2\omega_0^2} \ddot{\mathbf{P}} + \gamma \mathbf{P} = \mathbf{D}$$

D'altra parte in condizioni statiche sappiamo che deve risultare (vedi eq. (5.1.4))

$$(5.2.10) \quad \mathbf{P} = \frac{1}{4\pi\epsilon^*} \mathbf{D}$$

Confrontando la (10) con la (9) scritta per il caso statico concludiamo che

$$(5.2.11) \quad \gamma = 4\pi\epsilon^*$$

Il momento coniugato a $\mathbf{P}(\mathbf{r})$ sarà

$$(5.2.12) \quad \boldsymbol{\pi}(\mathbf{r}) = \frac{\delta L}{\delta \dot{\mathbf{P}}(\mathbf{r})} = \frac{\gamma}{\omega_0^2} \dot{\mathbf{P}}(\mathbf{r}) = \mu \dot{\mathbf{P}}(\mathbf{r})$$

dove si è posto

$$(5.2.13) \quad \mu = \frac{\gamma}{\omega_0^2} = \frac{4\pi\epsilon^*}{\omega_0^2}$$

L'Hamiltoniana totale del sistema, includendo anche il termine di energia cinetica dell'elettrone $\mathbf{p}_e^2/2m$ sarà perciò data da

$$(5.2.14) \quad H = \frac{\mathbf{p}_e^2}{2m} + \int d\mathbf{r} (\boldsymbol{\pi} \cdot \dot{\mathbf{P}} - \mathcal{L}) = \\ = \frac{\mathbf{p}_e^2}{2m} + \frac{\mu}{2} \int d\mathbf{r} (\dot{\mathbf{P}}^2 + \omega_0^2 \mathbf{P}^2) - \int d\mathbf{r} \mathbf{P} \cdot \mathbf{D} = H_0 + H_I$$

Ricordando che $\nabla \times \mathbf{P} = 0$ potremo scrivere

$$(5.2.15) \quad 4\pi\mathbf{P} = \nabla \phi$$

da cui segue che

$$(5.2.16) \quad H_I = - \int d\mathbf{r} \mathbf{P} \cdot \mathbf{D} = - \frac{e}{4\pi} \int d\mathbf{r} (\nabla \phi) \cdot \nabla (1/|\mathbf{r} - \mathbf{r}_e|) = \\ = \frac{e}{4\pi} \int d\mathbf{r} \phi \nabla^2 (1/|\mathbf{r} - \mathbf{r}_e|) = (-e) \phi(\mathbf{r}_e)$$

dove si è usato il risultato $\nabla^2 (1/|\mathbf{r} - \mathbf{r}_e|) = -4\pi\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_e)$. Per quantizzare l'hamiltoniana (14) procederemo nel modo usuale: poiché $\hat{\mathbf{P}}(\mathbf{r})$ e $\hat{\boldsymbol{\pi}}(\mathbf{r})$ sono variabili canonicamente coniugate soddisferanno le regole di commutazione

$$(5.2.17) \quad [\hat{P}_i(\mathbf{r}), \hat{\pi}_j(\mathbf{r}')] = i\hbar\delta_{ij}\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$$

Le (17) possono venire realizzate ponendo

$$\begin{aligned}
 \hat{P}(\mathbf{r}) &= \sqrt{\frac{\hbar}{2\mu\omega_0}} [\hat{b}(\mathbf{r}) + \hat{b}^+(\mathbf{r})] \\
 i\hat{\Pi}(\mathbf{r}) &= \sqrt{\frac{\hbar\mu\omega_0}{2}} [\hat{b}(\mathbf{r}) - \hat{b}^+(\mathbf{r})]
 \end{aligned}
 \tag{5.2.18}$$

dove gli operatori \hat{b} , \hat{b}^+ soddisfano alle regole di commutazione bosoniche. Sviluppiamo ora $\hat{P}(\mathbf{r})$, $\hat{\Pi}(\mathbf{r})$ in serie di Fourier, ricordando che essi contengono solo la parte longitudinale:

$$\hat{P}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\mathbf{q}} \frac{\hat{P}_{\mathbf{q}}}{|\mathbf{q}|} e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}}
 \tag{5.2.19}$$

$$i\hat{\Pi}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\mathbf{q}} \frac{\hat{\Pi}_{\mathbf{q}}}{|\mathbf{q}|} e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}}$$

Utilizzando un analogo sviluppo per gli operatori $\hat{b}(\mathbf{r})$ e $\hat{b}^+(\mathbf{r})$ si ottiene:

$$\begin{aligned}
 P_{\mathbf{q}} &= \sqrt{\frac{\hbar}{2\mu\omega_0}} (\hat{b}_{\mathbf{q}} + \hat{b}_{\mathbf{q}}^+) \\
 i\Pi_{\mathbf{q}} &= \sqrt{\frac{\hbar\mu\omega_0}{2}} (\hat{b}_{\mathbf{q}} - \hat{b}_{\mathbf{q}}^+)
 \end{aligned}
 \tag{5.2.20}$$

dove gli operatori $\hat{b}_{\mathbf{q}}$, $\hat{b}_{\mathbf{q}}^+$ soddisfano le usuali regole di commutazione bosoniche.

Dalle equazioni (19), (20) segue che

$$\hat{P}(\mathbf{r}) = \sqrt{\frac{\hbar}{2\mu\omega_0 V}} \sum_{\mathbf{q}} \frac{\mathbf{q}}{|\mathbf{q}|} [\hat{b}_{\mathbf{q}} e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} + \hat{b}_{\mathbf{q}}^+ e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}}]
 \tag{5.2.21}$$

Ricordando poi la definizione (15) di $\hat{\phi}$ otteniamo

$$\hat{\phi}(\mathbf{r}) = 4\pi i \sqrt{\frac{\hbar}{2\mu\omega_0 V}} \sum_{\mathbf{q}} \frac{1}{|\mathbf{q}|} [\hat{b}_{\mathbf{q}} e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} - \hat{b}_{\mathbf{q}}^+ e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}}]
 \tag{5.2.22}$$

Sostituendo le equazioni (21) e (22) nell'espressione (14) dell'hamiltoniana si trova

$$\begin{aligned}
 \hat{H}_0 &= \frac{\hat{p}^2}{2m} + \hbar\omega_0 \sum_{\mathbf{q}} [\hat{b}_{\mathbf{q}}^+ \hat{b}_{\mathbf{q}} + 1/2] \\
 \hat{H}_1 &= (-4\pi i) \sqrt{\frac{\hbar e^2}{2\mu\omega_0 V}} \sum_{\mathbf{q}} \frac{1}{|\mathbf{q}|} [\hat{b}_{\mathbf{q}} e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} - \hat{b}_{\mathbf{q}}^+ e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}}]
 \end{aligned}
 \tag{5.2.23}$$

Ponendo

$$(5.2.24) \quad V_q = 4\pi i \sqrt{\frac{\hbar e^2}{2\mu\omega_0 V}} \frac{1}{|q|}$$

l'espressione per \hat{H}_1 e' anche

$$(5.2.25) \quad \hat{H}_1 = \sum_q [V_q \hat{b}_q^+ e^{-iqr} + h.c.]$$

Ricordando l'espressione (5.1.18) per la costante di accoppiamento α e la definizione (13) di μ si ottiene che l'espressione (24) per V_q e' anche

$$(5.2.26) \quad V_q = i\hbar\omega_0 \sqrt{\frac{4\pi\alpha}{q_0^3 V}} \frac{q_0}{|q|}$$

dove

$$(5.2.27) \quad q_0 = \sqrt{\frac{2m\omega_0}{\hbar}} = \sqrt{2} \ell_{din}^{-1}$$

5.3 APPROCCIO PERTURBATIVO [4]

Riscriviamo l'espressione per l'hamiltoniana derivata nel paragrafo 2:

$$(5.3.1) \quad \hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \hbar\omega_0 \sum_q \hat{b}_q^+ \hat{b}_q + \sum_q [V_q \hat{b}_q^+ e^{-iqr} + h.c.] = \hat{H}_0 + \hat{H}_1$$

Nella (1) si e' posto per semplicita' $r_{el} = r$ e si e' tralasciato il termine costante, ma nominalmente divergente [5], $\sum_q (\hbar\omega_0/2)$. Gli autostati di H sono prodotti diretti di autostati $|p\rangle$ che descrivono l'elettrone a impulso definito e di autostati $|n_q\rangle$ del termine vibrazionale, caratterizzati da un set di numeri di occupazione n_q per ciascun modo normale di vettore d'onda q . Indicheremo questi stati imperturbati come $|p, n_q\rangle$:

$$(5.3.2) \quad |p, n_q\rangle = \prod_q \frac{(\hat{b}_q^+)^{n_q}}{\sqrt{n_q!}} |p, 0\rangle$$

dove

$$\langle r|p\rangle = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{ipr/\hbar}$$

e dove $|0\rangle$ rappresenta il "vuoto vibrazionale", cioe' lo stato con

[4] D. Pines, in "Polarons and excitons", op. cit. pag. 33. Vedi anche J. Appel, Solid State Phys.21(1968)193 e referenze ivi citate.

[5] La presenza di questo termine formalmente divergente e' dovuta all'aver approssimato il reticolo come un continuo dielettrico.

occupazione nulla per ogni modo normale. Come si verifica facilmente l'hamiltoniana H commuta con l'impulso totale

$$(5.3.3) \quad \hat{P} = \hat{p} + \hbar \sum_i q \hat{n}_i$$

Gli autostati di \hat{H} saranno pertanto caratterizzati da un valore ben definito dell'impulso totale, e saranno perciò della forma

$$(5.3.4) \quad |\psi_P\rangle = \sum_{\{n_i\}} C_P[\{n_i\}] |p, n_i\rangle$$

con

$$(5.3.5) \quad p = P - \hbar \sum_i q n_i$$

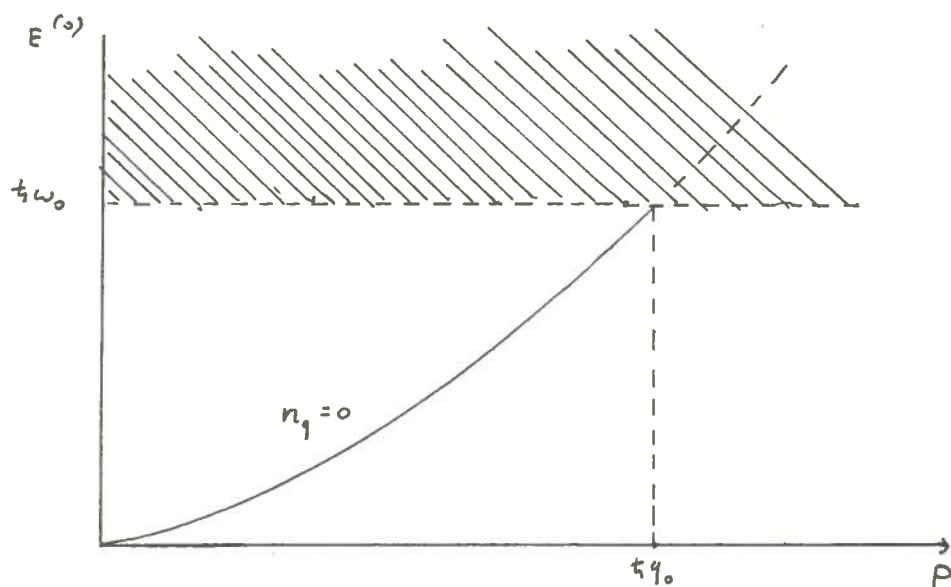
Converrà pertanto classificare anche gli stati imperturbati (2) in base al loro impulso totale P : scriveremo pertanto

$$(5.3.6) \quad |\phi_P, n_i\rangle = |P - \hbar \sum_i q n_i, n_i\rangle$$

L'energia imperturbata del generico stato (6) vale

$$(5.3.7) \quad E_{P, n_i}^{(0)} = \frac{1}{2m} (P - \hbar \sum_i q n_i)^2 + \sum_i \hbar \omega_i n_i$$

Le energie (7) possono essere, per P fissato, largamente degeneri; tuttavia per $E^{(0)} < \hbar \omega_0$ (il che implica che tutti gli n_i sono nulli, e inoltre $|P| < \hbar q_0 = (2m \omega_0 \hbar)^{1/2}$) vi è un solo valore di E per ogni valore di P (vedi figura)



Limitandoci a considerare gli stati con $E^{(0)} < \hbar \omega_0$ potremo pertanto applicare la teoria delle perturbazioni ordinaria. Lo stato imperturbato sarà del tipo (6) con $|P| < \hbar q_0$ e $n_i = 0$:

$$(5.3.8) \quad |\phi_P\rangle = |P, 0\rangle$$

Scrivendo

$$|\psi_P\rangle = |\phi_P\rangle + |\psi_P^{(1)}\rangle + \dots$$

(5.3.9)

$$E_p = E_p^{(0)} + \Delta E_p^{(2)} + \dots$$

con le formule perturbative standard si ottiene

$$|\psi_p^{(1)}\rangle = - \sum_q \frac{\langle P-\hbar q, n_q=1 | \hat{H}_1 | P, 0 \rangle}{\hbar^2 q^2 / 2m + \hbar \omega_0 - \hbar Pq/m} |P-\hbar q, n_q=1\rangle$$

(5.3.10)

$$= - \sum_q \frac{V_q}{\hbar^2 q^2 / 2m + \hbar \omega_0 - \hbar Pq/m} |P-\hbar q, n_q=1\rangle$$

$$(5.3.11) \quad \Delta E_p^{(2)} = - \sum_q \frac{|V_q|^2}{\hbar^2 q^2 / 2m + \hbar \omega_0 - \hbar Pq/m}$$

Dalla (11), trasformando la somma in un integrale ($\sum_q \rightarrow \frac{V}{2\pi^2} \int dq$) e ricordando la (5.2.24) si ottiene, dopo semplici passaggi:

$$(5.3.12) \quad \Delta E_p^{(2)} = (-\hbar \omega_0) \frac{\alpha}{\pi} \int_0^\infty dx \int_{-1}^1 d(\cos \theta) \frac{1}{1+x^2-2x|P| \cos \theta / (\hbar q_0)}$$

Sviluppando in serie fino al second'ordine in $|P|/(\hbar q_0)$ la (12) fornisce

$$(5.3.13) \quad \Delta E_p^{(2)} = (-\hbar \omega_0) \frac{\alpha}{\pi} \left\{ \int_0^\infty dx \frac{2}{1+x^2} + \frac{8 P^2}{3(\hbar q_0)^2} \int_0^\infty dx \frac{x^2}{(1+x^2)^3} + \right. \\ \left. + O(P^4/(\hbar q_0)^4) \right\}$$

Usando le formule di ricorrenza

$$I_n = \int_0^\infty \frac{dx}{(1+x^2)^n} = \frac{2n-3}{2n-2} I_{n-1}$$

$$I_1 = \pi/2$$

si ottiene facilmente dalla (13)

$$(5.3.14) \quad \Delta E_p^{(2)} = -\hbar \omega_0 \alpha [1 + P^2 / (6 \hbar^2 q_0^2) + O(P^4/(\hbar q_0)^4)]$$

Ricordando che $\hbar^2 q_0^2 / 2m = \hbar \omega_0$, dalla (14) otteniamo

$$(5.3.15) \quad E_p^{(2)} = P^2 / 2m + \Delta E_p^{(2)} = -\alpha \hbar \omega_0 + P^2 / 2m (1 - \alpha/6) + O(P^4)$$

cioe' anche

$$(5.3.16) \quad E_p^{(2)} = -\alpha \hbar \omega_0 + P^2 / 2m^* + O(P^4)$$

con

$$(5.3.17) \quad m^* = m / (1 - \alpha/6)$$

Calcoliamo ora il numero medio di modi vibrazionali (fononi ottici) occupati nello stato con $P=0$:

$$\begin{aligned} \langle N \rangle &= \langle \psi_{P=0}^{(1)} | \sum_q \hat{b}_q^+ \hat{b}_q | \psi_{P=0}^{(1)} \rangle \\ (5.3.18) \quad &= \sum_q \frac{|V_q|^2}{(\hbar^2 q^2 / 2m + \hbar \omega_q)^2} \end{aligned}$$

Dalla (18) si ottiene, dopo semplici passaggi,

$$(5.3.19) \quad \langle N \rangle = \frac{2\alpha}{\pi} \int_0^\infty dx \frac{1}{(1+x^2)^2} = \frac{\alpha}{2}$$

L'equazione (17) fornisce la massa efficace del polarone ottenuta col metodo perturbativo; si noti che per $\alpha > 6$ l'approccio perturbativo evidentemente diviene privo di senso. L'equazione (19) d'altronde fornisce un significato semplice per la costante α , legandola direttamente al numero medio di fononi virtuali contenuti nella nube di polarizzazione che l'elettrone trascina con se' nel suo moto. Notiamo tuttavia che per $\alpha > 2$ il risultato (19) non e' piu' affidabile in quanto esso porta ad una inconsistenza: mentre lo stato $|\psi_0^{(1)}\rangle$ contiene stati con al piu' un fonone presente, la (19) prevede $\langle N \rangle > 1$ per $\alpha > 2$!

Dai due risultati (17) e (19) segue percio' che per $\alpha > 2$ la teoria perturbativa e' altamente questionabile, e per $\alpha > 6$ e' completamente priva di senso. E' noto [6] che per la maggior parte dei cristalli ionici si ha $\alpha \sim 5 \div 6$, e la teoria perturbativa non e' percio' applicabile.

CAPITOLO 6

IL POLARONE - TECNICHE NON PERTURBATIVE

6.1 METODO DELLE TRASFORMAZIONI CANONICHE

Come si e' visto nel paragrafo 5.3 la teoria delle perturbazioni non e' sufficiente per descrivere il polarone nella regione fisicamente rilevante $\alpha \sim 5$. Un metodo che si rivela piu' adeguato a tale scopo e' quello sviluppato da Lee, Low e Pines [1], in cui si opera una appropriata trasformazione canonica che consente successivamente di utilizzare l'approccio variazionale in una forma particolarmente flessibile.

Ripartiamo dall'hamiltoniana (5.3.1). Gli autostati di \hat{H} soddisfano all'equazione

$$(6.1.1) \quad \hat{H} |\psi\rangle = E |\psi\rangle$$

[6] Si veda per esempio C. Kittel, "Quantum Theory of Solids", pag. 140.

[1] T. D. Lee, F. Low e D. Pines, Phys. Rev. 90(1953)297.

Operiamo la trasformazione [2]

$$(6.1.2) \quad |\tilde{\psi}\rangle = \exp\{\hat{S}\} |\psi\rangle$$

$$\tilde{H} = e^{\hat{S}} \hat{H} e^{-\hat{S}}$$

da cui naturalmente segue subito

$$(6.1.3) \quad \tilde{H} |\tilde{\psi}\rangle = E |\tilde{\psi}\rangle$$

E' conveniente scegliere per S l'espressione

$$(6.1.4) \quad \hat{S} = i \sum_q \hat{b}_q^+ \hat{b}_q (qr)$$

Usando la formula

$$(6.1.5) \quad e^{\hat{S}} \hat{A} e^{-\hat{S}} = \hat{A} + [\hat{S}, \hat{A}] + 1/2 [\hat{S}, [\hat{S}, \hat{A}]] + \dots$$

si ottengono i trasformati degli operatori \hat{p} , \hat{b}_q^+ e \hat{b}_q . Si trova:

$$(6.1.6) \quad \tilde{p} = \hat{p} - \hbar \sum_q q \hat{n}_q$$

$$\tilde{b}_q = \hat{b}_q \exp\{-iqr\}$$

$$\tilde{b}_q^+ = \hat{b}_q^+ \exp\{iqr\}$$

Si noti che dalla prima equazione delle (6) segue che il trasformato dell'impulso totale P dato dalle (5.3.3) vale $\tilde{P} = p$. Osservando che l'hamiltoniana trasformata \tilde{H} avra' ovviamente la stessa dipendenza funzionale da \tilde{p} , \tilde{b} e \tilde{b}^+ che \hat{H} aveva da \hat{p} , \hat{b} e \hat{b}^+ , ricordando l'espressione (5.3.1) per \hat{H} e usando la (6) si trova subito:

$$(6.1.7) \quad \tilde{H} = \frac{1}{2m} (\hat{p} - \sum_q \hbar q \hat{n}_q)^2$$

$$+ \hbar \omega_0 \sum_q \hat{b}_q^+ \hat{b}_q + \sum_q (V_q \hat{b}_q^+ + \text{h.c.})$$

Notiamo che \tilde{H} non dipende piu' dalla coordinata elettronica r, e quindi commuta con p. Questo non ci stupisce, in quanto $p = \tilde{P}$, e inoltre \tilde{P} deve essere una costante del moto per \tilde{H} .

Dato che p commuta con \tilde{H} , puo' essere trattato come un numero complesso nella (7); dato che inoltre p ha il significato di impulso totale del trasformato dello stato $|\psi_p\rangle$ in cui l'impulso totale vale P, potremo d'ora in avanti identificare nella (7) P con p.

Tratteremo ora \tilde{H} variazionalmente, prendendo come stato di prova $|\phi\rangle$ un prodotto di stati coerenti per ogni modo q; scriveremo cioe'

$$(6.1.8) \quad |\phi\rangle = \exp\{\hat{U}\} |0\rangle$$

con

$$(6.1.9) \quad \hat{U} = \sum_q (z_q \hat{b}_q^+ + z_q^* \hat{b}_q)$$

[2] Omettiamo il simbolo ^ sugli operatori tildati (~) per ovvie ragioni grafiche.

Notare che $\exp\{\hat{U}\}$ e' unitario, e quindi $|\phi\rangle$ risulta automaticamente normalizzato.

Usando la nota formula

$$e^{(\hat{A}+\hat{B})} = e^{\hat{A}} e^{\hat{B}} e^{-[\hat{A},\hat{B}]/2}$$

valida nel caso che il commutatore $[\hat{A},\hat{B}]$ sia un numero complesso, dalle (8), (9) otteniamo

$$(6.1.10) \quad |\phi\rangle = \prod_1 e^{-z_1^* z_1 / 2} e^{z_1 \hat{b}_1^+} |0\rangle$$

Dalla (10) si ottiene inoltre facilmente che

$$(6.1.11) \quad \langle n_1 | \phi \rangle = \prod_1 \left\{ e^{-|z_1|^2 / 2} \frac{(z_1)^{n_1}}{(n_1!)^{1/2}} \right\}$$

La (11) mostra che i parametri variazionali z_1 sono legati in maniera semplice alla probabilita' di una determinata occupazione n_1 per il generico modo normale q

$$(6.1.12) \quad P(n_1) = e^{-|z_1|^2} \frac{(|z_1|^2)^{n_1}}{n_1!}$$

fornita dalla distribuzione di Poisson (12).

Dall'equazione (8) otteniamo

$$(6.1.13) \quad \langle \phi | \tilde{H} | \phi \rangle = \langle 0 | e^{-\hat{U}} \tilde{H} e^{\hat{U}} | 0 \rangle = \langle 0 | \hat{\mathcal{H}} | 0 \rangle$$

ove si e' posto

$$(6.1.14) \quad \hat{\mathcal{H}} = e^{-\hat{U}} \tilde{H} e^{\hat{U}}$$

Usando ancora la (5) possiamo ottenere i trasformati di \hat{b}_1, \hat{b}_1^+ secondo la trasformazione (14); si trova subito

$$(6.1.15) \quad \begin{aligned} e^{-\hat{U}} \hat{b}_1 e^{\hat{U}} &= \hat{b}_1 - [\hat{U}, \hat{b}_1] = \hat{b}_1 + z_1 \\ e^{-\hat{U}} \hat{b}_1^+ e^{\hat{U}} &= \hat{b}_1^+ - [\hat{U}, \hat{b}_1^+] = \hat{b}_1^+ + z_1^* \end{aligned}$$

La nuova hamiltoniana sara' data percio' da

$$(6.1.16) \quad \begin{aligned} \hat{\mathcal{H}} &= \frac{1}{2m} [P - \hbar \sum_1 q (\hat{b}_1^+ + z_1^*)(\hat{b}_1 + z_1)]^2 \\ &+ \hbar \omega_0 \sum_1 (\hat{b}_1^+ + z_1^*)(\hat{b}_1 + z_1) \\ &+ \sum_1 (V_1 \hat{b}_1^+ + \text{h.c.}) + \sum_1 (V_1 z_1^* + \text{h.c.}) \end{aligned}$$

Notiamo ora che per poter valutare $\langle \phi | \tilde{H} | \phi \rangle$ ci basta, in accordo con la (13), valutare il valore di aspettazione di $\hat{\mathcal{H}}$ sul vuoto dei \hat{b} : otteniamo

così

$$(6.1.17) \quad E = \frac{P^2}{2m} + \sum_1 [\hbar \omega_0 + \frac{\hbar^2 q^2}{2m} - \frac{\hbar}{m} Pq] |z_1|^2 + \frac{\hbar^2}{2m} \left(\sum_1 q |z_1|^2 \right)^2 + \sum_1 V_1 (z_1^* - z_1)$$

Semplifichiamo l'espressione precedente mettendoci nel caso $P = 0$:

$$(6.1.18) \quad E_{P=0} = \sum_1 \left[\hbar \omega_0 + \frac{\hbar^2 q^2}{2m} \right] |z_1|^2 + \frac{\hbar^2}{2m} \left(\sum_1 q |z_1|^2 \right)^2 + \sum_1 V_1 (z_1^* - z_1)$$

I parametri variazionali z_1, z_1^* saranno ora determinati dalla condizione che l'energia media (18) sia minima:

$$(6.1.19) \quad \frac{\partial E}{\partial z_1^*} = \frac{\partial E}{\partial z_1} = 0$$

da cui si ottiene

$$(6.1.20) \quad z_1 = \frac{-V_1}{\hbar (\omega_0 + \hbar q^2/2m) + (\hbar^2/m) q \cdot \sum_1 q' |z_1|^2}$$

Per motivi di simmetria ci aspettiamo che z_1 dipenda solo dal modulo di q . Sarà perciò

$$\sum_1 q |z_1|^2 = 0$$

e la (20) si riduce a

$$(6.1.21) \quad z_1 = \frac{-V_1}{\hbar \omega_0 + \hbar^2 q^2 / (2m)}$$

Sostituendo la (21) nella (18) otteniamo

$$(6.1.22) \quad E_{P=0} = \frac{-|V_1|^2}{\hbar \omega_0 + \hbar^2 q^2 / (2m)}$$

La (22) coincide con l'espressione (5.3.11) per $E^{(2)}$ nel caso $P=0$, che si era trovata valere $-\alpha \hbar \omega_0$; otteniamo così

$$(6.1.23) \quad E_{P=0} = -\alpha \hbar \omega_0$$

cioè lo stesso risultato del calcolo perturbativo. Calcoliamo ora il numero medio di fononi presenti nello stato variazionale $|\phi\rangle$; sarà

$$(6.1.24) \quad \begin{aligned} \langle N \rangle &= \langle \phi | \sum_1 \hat{b}_1^+ \hat{b}_1 | \phi \rangle = \sum_1 \langle 0 | \exp\{-\hat{U}\} \hat{b}_1^+ \hat{b}_1 \exp\{\hat{U}\} | 0 \rangle = \\ &= \sum_1 \langle 0 | (\hat{b}_1^+ + z_1^*) (\hat{b}_1 + z_1) | 0 \rangle \\ &= \sum_1 |z_1|^2 \end{aligned}$$

Sostituendo la (21) nella (24) otteniamo

$$(6.1.25) \quad \langle N \rangle = \sum_1 \frac{|V_1|^2}{[\hbar \omega_0 + \hbar^2 q^2 / (2m)]} = \frac{\alpha}{2}$$

in quanto la somma e' la stessa che compariva nella (5.3.18) e che era stata valutata nella (5.3.19). Anche per quel che riguarda il numero medio di fononi il presente metodo variazionale fornisce dunque lo stesso risultato $\langle N \rangle = \alpha/2$ della teoria perturbativa; notiamo tuttavia che qui tale risultato appare molto piu' affidabile anche per $\alpha > 2$ poiche' lo stato variazionale (10), a differenza di quello perturbativo, e' una combinazione di stati con un numero qualsiasi di fononi.

Torniamo ora all'espressione (17) per E con $P \neq 0$; minimizzando E rispetto a z_1^* , z_1 si ottiene

$$(6.1.26) \quad z_1 = \frac{-V_1}{\hbar \omega_0 + \hbar^2 q^2 / (2m) - \hbar P q [1 - \eta] / m}$$

dove, seguendo Pines [3], si e' posto

$$(6.1.27) \quad \hbar \sum_1 q |z_1|^2 = \eta P$$

Si noti che per motivi di simmetria il parametro η definito dalla (27) dev'essere funzione del solo modulo di P. Sostituendo la (26) nel primo membro della (27) otteniamo una equazione self-consistente per η che risolta all'ordine piu' basso in $|P|$ fornisce

$$(6.1.28) \quad \eta(P) = \frac{\alpha/6}{1 + \alpha/6} + O(P^2)$$

Inserendo la (26) nella (17) si ottiene, tenuto conto della (28):

$$(6.1.29) \quad E = -\alpha \hbar \omega_0 + \frac{1}{1 + \alpha/6} \frac{P^2}{2m} + O(P^4)$$

che riscritto in termini di massa efficace diviene

$$(6.1.30) \quad E = -\alpha \hbar \omega_0 + \frac{P^2}{2 m^*} + O(P^4)$$

con la massa efficace definita da

$$(6.1.31) \quad m^* = m (1 + \alpha/6)$$

La (31) per $\alpha \ll 1$ riproduce il risultato perturbativo (5.3.17), mentre per $\alpha > 1$ fornisce un'espressione per la massa efficace che cresce molto piu' lentamente con α , e non presenta piu' la catastrofe ad $\alpha = 6$.

6.2 METODO DEGLI INTEGRALI DI FEYNMAN

Nel paragrafo 5.3 cosi' come nel paragrafo 6.1 abbiamo sviluppato tecniche per studiare l'hamiltoniana di interazione tra un singolo elettrone e i fononi ottici longitudinali di un cristallo ionico. Entrambe

[3] D. Pines, in "Polarons and Excitons", op. cit. pag.33.

le approssimazioni però non lavorano uniformemente su tutto il range di variabilità della costante di accoppiamento α . Esse infatti, per come sono state ricavate, risultano strettamente consistenti solo per piccoli valori di α . Ad esempio nel caso perturbativo α non può assolutamente essere $\alpha > 6$ (per $\alpha = 6$ divergerebbe la massa efficace). Ci proponiamo quindi, in questo paragrafo, di determinare un limite superiore al livello energetico fondamentale del polarone valido per tutto il range di α . Utilizzeremo per questo il metodo variazionale proposto da Feynman [4] e sviluppato con il linguaggio dell'integrazione funzionale.

L'hamiltoniana che descrive il sistema sarà dunque (vedi (5.3.1)):

$$(6.2.1) \quad \hat{H} = \frac{\hat{P}^2}{2m} + \sum_q \omega_q \hat{b}_q^\dagger \hat{b}_q + \sum_q [V_q e^{iqr} \hat{b}_q + V_q^* e^{-iqr} \hat{b}_q^\dagger]$$

Determiniamo, per ora, l'interazione efficace a cui è soggetto l'elettrone una volta eliminati i gradi di libertà bosonici. Data l'hamiltoniana (1) esprimiamo la funzione di partizione totale Z come un integrale funzionale:

$$(6.2.2) \quad Z = \int D\mathbf{r} e^{S_{el}^0} \int \prod_q Db_q^* Db_q e^{S_{ph}^0} e^{S_{int}}$$

con

$$(6.2.3a) \quad S_{el}^0 = - \int_0^\beta d\tau \quad m\dot{\mathbf{r}}^2/2$$

azione libera dell'elettrone espressa tramite il campo reale $\mathbf{r}(\tau)$ associato all'operatore di posizione elettronico,

$$(6.2.3b) \quad S_{ph}^0 = - \sum_q \int_0^\beta d\tau [b_q^* \dot{b}_q + \omega_q b_q^* b_q]$$

azione libera degli oscillatori con b_q^* (b_q) variabili complesse associate agli operatori di creazione (distruzione) bosonici \hat{b}_q^\dagger (\hat{b}_q) e

$$(6.2.3c) \quad S_{int} = - \sum_q \int_0^\beta d\tau [J_q^* b_q + J_q b_q^*]$$

parte interagente dell'azione. Si ricordi che l'integrale funzionale definito nella (2) è fatto con opportune condizioni al contorno sui campi, e precisamente

$$\mathbf{r}(0) = \mathbf{r}(\beta)$$

$$b(0) = b(\beta)$$

$$b^*(0) = b^*(\beta)$$

Per confronto con la (1) J_q^* e J_q nella (3c) sono definite come

$$(6.2.3d) \quad J_q^* = V_q e^{iqr}$$

$$J_q = V_q^* e^{-iqr}$$

Ricordando l'espressione funzionale della funzione di partizione Z associata ai fononi liberi riscriviamo la (2) nel seguente modo:

[4] R. Feynman, Phys. Rev. 97(1955)660.

$$(6.2.4) \quad \frac{Z}{Z_{rh}^{\circ}} = \int Dr e^{S_{el}^{\circ}} \frac{\int \prod_1 Db_1^* Db_1 e^{S_{rh}^{\circ}} e^{S_{int}}}{\int \prod_1 Db_1^* Db_1 e^{S_{rh}^{\circ}}} =$$

$$= \int Dr e^{S_{el}^{\circ}} Z_r [J_1^*, J_1]$$

con $Z_r [J_1^*, J_1]$ ovviamente definito come

$$(6.2.5) \quad Z_r [J_1^*, J_1] = \frac{\int \prod_1 Db_1^* Db_1 e^{S_{rh}^{\circ}} e^{S_{int}}}{\int \prod_1 Db_1^* Db_1 e^{S_{rh}^{\circ}}}$$

Osserviamo che la quantità espressa nella (5) ha la tipica forma di un funzionale generatore dipendente dalle "sorgenti esterne" J_1^* e J_1 con le corrette condizioni al contorno: infatti

$$Z_r [J_1 = J_1^* = 0] = 1$$

Calcoliamo ora la (5). Il metodo che sceglieremo sarà un semplice completamento di quadrati. Operiamo il seguente cambiamento di variabili:

$$\begin{aligned} \bar{b}_1^* &= b_1^* + z_1^* \\ \bar{b}_1 &= b_1 + z_1 \end{aligned}$$

z_1^* e z_1 sono anch'esse funzioni periodiche in $[0, \beta]$ e vanno scelte in modo tale che l'esponente dell'integrando in (5) non contenga termini lineari in \bar{b}_1^* e \bar{b}_1 . Ciò equivale a imporre le seguenti 2 equazioni:

$$\left(\frac{\partial}{\partial \tau} + \omega_0\right) z_1 = J_1$$

(6.2.6)

$$\left(\frac{\partial}{\partial \tau} - \omega_0\right) z_1^* = -J_1^*$$

Utilizzando la (6) per l'azione espressa al numeratore della (5) otteniamo:

$$(6.2.7) \quad \begin{aligned} S_{rh}^{\circ} + S_{int} &= - \sum_1 \int_0^{\beta} \{ \bar{b}_1^* \left(\frac{\partial}{\partial \tau} + \omega_0\right) \bar{b}_1 - J_1^* z_1 \} d\tau = \\ &= S_{rh}^{\circ} [\bar{b}_1^*, \bar{b}_1] + \sum_1 \int_0^{\beta} d\tau J_1^* z_1 \end{aligned}$$

da cui sostituendo nella (5) avremo

$$(6.2.8) \quad Z_r [J_1^*, J_1] = \exp \left\{ \sum_1 \int_0^{\beta} d\tau J_1^* z_1 \right\}$$

Per ottenere ora una forma esplicita di $z_1(\tau)$ in (8) introduciamo la funzione di Green $G(\tau - \tau')$ che risolve l'equazione differenziale

$$(6.2.9a) \quad \left(\frac{\partial}{\partial \tau} + \omega_0\right) G(\tau - \tau') = -\delta(\tau - \tau')$$

con la condizione di periodicità

$$G(\tau < 0) = G(\tau + \beta)$$

In questo modo esprimiamo $z_1(\tau)$ come

$$(6.2.9b) \quad z_1(\tau) = - \int_0^{\beta} d\tau' G(\tau - \tau') J_1(\tau')$$

e quindi la (8) risulta essere:

$$(6.2.10) \quad Z_r [J_q^*, J_q] = \exp\left\{-\sum_{\tau} \int_0^{\beta} d\tau' J_q^*(\tau) G(\tau - \tau') J_q(\tau')\right\}$$

Date le condizioni al contorno di $G(\tau)$ espresse nella (9a) possiamo rappresentare la funzione di Green tramite la sua serie di Fourier nel seguente modo:

$$G(\tau) = \frac{1}{\beta} \sum_n \exp\{-i\omega_n \tau\} G(\omega_n)$$

con

$$\omega_n = (2n\pi) / \beta$$

Dall'equazione (9a) e' immediato ora verificare che la $G(\omega_n)$ risolve l'equazione algebrica:

$$G(\omega_n) (-i\omega_n + \omega_0) = -1$$

per cui

$$(6.2.11) \quad G(\tau - \tau') = \frac{1}{\beta} \sum_n \frac{e^{-i\omega_n(\tau - \tau')}}{i\omega_n - \omega_0}$$

La somma definita nella (11) e' facilmente calcolabile con il metodo di Poisson e fornisce

$$(6.2.12) \quad G(\tau - \tau') = \begin{cases} -e^{-\omega_0(\tau - \tau')} N(\omega_0) & \tau < \tau' \\ -e^{-\omega_0(\tau - \tau')} [1 + N(\omega_0)] & \tau > \tau' \end{cases}$$

dove $N(\omega)$ e' la distribuzione di Bose

$$N(\omega) = 1 / (\exp\{\beta\omega\} - 1)$$

Volendo trattare il limite asintotico di β grande possiamo con buona approssimazione supporre $N(\omega_0) \sim 0$. In questo limite sostituiamo la (12) nella (10) calcolando gia' la somma su q ; otteniamo cosi' la seguente espressione per $Z_r [J_q^*, J_q]$:

$$(6.2.13) \quad Z_r [J_q^*, J_q] = \frac{\alpha \omega_0^{3/2}}{2\sqrt{2m}} \int_0^{\beta} d\tau \int_0^{\beta} d\tau' \frac{e^{-\omega_0|\tau - \tau'|}}{|r(\tau) - r(\tau')|}$$

Nel seguito, per semplicita' di calcolo, considereremo $\omega_0 = 1$ e $m = 1$. A questo punto siamo in grado, confrontando la (13) con la (4) di esprimere la funzione di partizione totale del sistema. Si ricava infatti:

$$(6.2.14) \quad Z = Z_{rh}^0 \int Dr \exp\left\{-\int_0^{\beta} d\tau \dot{r}^2 / 2\right\} \exp\left\{-\frac{\alpha}{2\sqrt{2}} \int_0^{\beta} d\tau \int_0^{\beta} d\tau' \frac{e^{-|\tau - \tau'|}}{|r(\tau) - r(\tau')|}\right\}$$

Notiamo dall'espressione (14) che avere integrato i gradi di liberta'

bosonici introduce un'interazione con memoria (non locale nel tempo) per l'elettrone. Intuitivamente l'interazione dei fononi con l'elettrone fa sì che esista una interazione efficace ritardata tra le diverse posizioni assunte dall'elettrone. Nostro scopo sarà ora quello di determinare un limite superiore al livello energetico fondamentale del polarone. Per questo nel seguito non considereremo l'intera funzione di partizione Z, ma più semplicemente un particolare elemento di matrice $\rho(r, r')$ definito da

$$(6.2.15) \quad \rho(r, r') = \sum_n \langle r', n | \exp\{-\beta \hat{H}\} | r, n \rangle$$

dove $|n\rangle = |n_1, n_2, \dots, n_1, \dots\rangle$ è un generico stato a numero definito di fononi.

Ripercorrendo quanto sviluppato per Z abbiamo che $\rho(r, r')$ può essere espressa come

$$(6.2.16) \quad \rho(r, r') = Z_{ph}^0 \int_{r(0)=r'}^{r(\beta)=r} Dr \exp\{S\}$$

con

$$(6.2.17) \quad S = - \int_0^\beta d\tau \dot{r}^2 / 2 + \frac{\alpha}{2\sqrt{2}} \int_0^\beta d\tau \int_0^\beta d\tau' \frac{e^{-|\tau - \tau'|}}{|r(\tau) - r(\tau')|}$$

Osserviamo che l'equazione (16) può essere riscritta nel seguente modo:

$$(6.2.18) \quad \rho(r, r') = Z_{ph}^0 \langle e^{S-S_1} \rangle \int_{r(0)=r'}^{r(\beta)=r} Dr \exp\{S_1\}$$

con S_1 generica azione ed intendendo la media nella (18) come definita da

$$\langle F \rangle = \frac{\int Dr e^{S_1} F}{\int Dr e^{S_1}}$$

Se teniamo conto che per una generica quantità F risulta [5]

$$\langle \exp\{F\} \rangle \geq \exp\{\langle F \rangle\}$$

otteniamo per $\rho(r, r')$ la seguente disuguaglianza:

$$(6.2.19) \quad \rho(r, r') \geq \tilde{\rho}(r, r') = Z_{ph}^0 e^{\langle S-S_1 \rangle} \int Dr e^{S_1}$$

Consideriamo ora il limite di $\beta \rightarrow \infty$; dalla (15) otteniamo che

$$(6.2.20a) \quad \rho(r, r') \rightarrow A \exp\{-\beta E_0\}$$

E_0 essendo il livello fondamentale dell'hamiltoniana \hat{H} , mentre dalla (19) ricaviamo che

$$(6.2.20b) \quad \tilde{\rho}(r, r') \rightarrow B \exp\{-\beta E_1\} \exp\{\beta E'\}$$

dove E_1 corrisponde al livello energetico fondamentale relativo all'azione S_1 ed E' è una quantità definita in modo tale che:

[5] T. D. Schultz, "Polarons and Excitons", op. cit. pag. 71.

$$(6.2.21) \quad \langle S - S_1 \rangle \rightarrow \beta E'$$

Confrontando la (20a) con la (20b) e tenendo presente la disuguaglianza (19) troviamo

$$(6.2.22) \quad E_0 \leq E = E_1 - E'$$

cioè E è il limite superiore al livello energetico cercato E_0 . Fino ad ora non abbiamo definito esplicitamente l'azione di prova S_1 . Come osservato da Feynman differenti scelte di S_1 forniscono diversi valori per l'energia E corrispondenti ai vari metodi con i quali viene trattata l'hamiltoniana del polarone. Ad esempio scegliendo S_1 come azione di particella libera, cioè

$$S_1 = - \int_0^\beta d\tau \dot{r}^2 / 2$$

otteniamo $E = -\alpha$; in questo modo riotteniamo il risultato perturbativo come pure il risultato del metodo variazionale esposto nel precedente paragrafo. Nel seguito [6] adotteremo un'azione S_1 quadratica e non locale nel tempo, e precisamente

$$(6.2.23) \quad S_1 = - \int_0^\beta d\tau \dot{r}^2 / 2 - c/2 \int_0^\beta d\tau \int_0^\beta d\tau' [r(\tau) - r(\tau')]^2 e^{-w|\tau - \tau'|}$$

dove c e w sono parametri variazionali da determinare in modo da minimizzare l'energia E. Data la (23) siamo ora in grado di esprimere E' definito dalla (21). Infatti

$$(6.2.24) \quad E' = \langle S - S_1 \rangle / \beta = A + B$$

dove

$$(6.2.24a) \quad A = \frac{\alpha}{2\sqrt{2}} \int_0^\beta d\tau \int_0^\beta d\tau' \left\langle \frac{1}{|r(\tau) - r(\tau')|} \right\rangle$$

$$(6.2.24b) \quad B = \frac{c}{2\beta} \int_0^\beta d\tau \int_0^\beta d\tau' \langle [r(\tau) - r(\tau')]^2 \rangle$$

Consideriamo la seguente trasformata di Fourier, di ovvio interesse data l'espressione (24a):

$$(6.2.25) \quad \left\langle \frac{1}{|r(t) - r(s)|} \right\rangle = \frac{1}{2\pi^2} \int dk \left\langle e^{\frac{ik(r(t) - r(s))}{k^2}} \right\rangle$$

Per determinare questa quantità occorre calcolare la media

$$(6.2.26) \quad I = \left\langle e^{\frac{ik(r(t) - r(s))}{k^2}} \right\rangle = \frac{\int Dr e^{\frac{ik(r(t) - r(s))}{k^2}} e^{S_1}}{\int Dr e^{S_1}} = \frac{\int Dr e^{\tilde{S}}}{\int Dr e^{S_1}}$$

[6] R. Feynman, Phys. Rev 97(1955)660

dove e' possibile esprimere \tilde{S} come:

$$(6.2.27) \quad \tilde{S} = - \int_0^\beta d\tau \dot{r}^2/2 + \int_0^\beta d\tau f(\tau) r(\tau) - c/2 \int_0^\beta d\tau \int_0^\beta d\tau' [r(\tau) - r(\tau')]^2 e^{-w|\tau - \tau'|}$$

con

$$f(\tau) = i k [\delta(\tau - t) - \delta(\tau - s)]$$

Daremo ora una traccia per la determinazione di I come definito dalla (26). L'integrale funzionale della (26) e' separabile nelle componenti cartesiane x, y e z di r. Dunque bastera' calcolare

$$(6.2.28) \quad I = \frac{\int Dx \exp\{\tilde{S}[x]\}}{\int Dx \exp\{S_1[x]\}}$$

con le condizioni al contorno

$$x(0) = x'$$

$$x(\beta) = x$$

Per l'arbitrarieta' dei valori che x(τ) assume in 0 e β scegliamo questi per comodita' uguali a 0, cioe'

$$x(0) = x(\beta) = 0$$

Per determinare la (28) utilizziamo il metodo del punto sella, cioe' cerchiamo i punti stazionari \bar{x} e \bar{x}_1 , tali che

$$\left. \frac{\delta \tilde{S}}{\delta x} \right|_{x=\bar{x}} = 0 \quad \left. \frac{\delta S_1}{\delta x} \right|_{x=\bar{x}_1} = 0$$

E' immediato verificare dalla espressione (27) di \tilde{S} che l'equazione per \bar{x} e'

$$(6.2.29) \quad \ddot{\bar{x}} = 2c \int_0^\beta d\tau' [\bar{x}(\tau) - \bar{x}(\tau')] e^{-w|\tau - \tau'|} - f_x(\tau)$$

con

$$\bar{x}(0) = \bar{x}(\beta) = 0$$

da cui

$$(6.2.30) \quad \tilde{S}[\bar{x}] = 1/2 \int_0^\beta d\tau f_x(\tau) \bar{x}(\tau)$$

mentre il punto sella \bar{x}_1 di S_1 soddisfa alla equazione

$$(6.2.31) \quad \ddot{\bar{x}}_1 = 2c \int_0^\beta d\tau' [\bar{x}_1(\tau) - \bar{x}_1(\tau')] e^{-w|\tau - \tau'|}$$

con

$$\bar{x}_1(0) = \bar{x}_1(\beta) = 0$$

per cui e' evidente che $\bar{x}_1(\tau) = 0$ e quindi

$$(6.2.32) \quad S_1[\bar{x}_1] = 0$$

Notiamo ora che la variazione seconda di $\tilde{S}[x]$ e' identica a quella di $S_1[x]$

visto che le azioni differiscono solo per un termine lineare in $x(\tau)$ ($f_x(\tau)$); grazie a cio', utilizzando la (30) e la (32) otteniamo che

$$(6.2.33) \quad I_x = \exp\left\{1/2 \int_0^\beta d\tau f_x(\tau) \bar{x}(\tau)\right\}$$

Come mostrato da Feynman [7] l'equazione per $\bar{x}(\tau)$ puo' essere separata e risolta. Nel limite di grandi β sostituendo la $\bar{x}(\tau)$ trovata nella (33) e ricordando che $I = I_x I_y I_z$, ricaviamo

$$(6.2.34) \quad I = \langle e^{ik(r(t)-r(s))} \rangle = \exp\left\{-\frac{2ck^2}{v^3 w} [1 - e^{-v|t-s|}] - \frac{w^2}{2v^2} k^2 |t-s|\right\}$$

dove si e' fatta la sostituzione

$$v^2 = w^2 + 4c/w$$

A questo punto, se integriamo I rispetto a k secondo l'espressione (25), siamo in grado di determinare, nel limite di $\beta \rightarrow \infty$ la quantita' A definita nella (24a):

$$(6.2.35) \quad A = \frac{\alpha v}{\sqrt{\pi}} \int_0^\beta [w^2 \tau + \frac{v^2 - w^2}{v} (1 - e^{-v\tau})]^{-1/2} e^{-\tau} d\tau$$

Per calcolare B occorre conoscere $\langle [r(t)-r(s)]^2 \rangle$. Questa quantita' puo' essere ottenuta sviluppando in serie ambo i membri della (34) rispetto a k fino all'ordine k^2 . Otteniamo cosi':

$$\frac{1}{3} \langle [r(t)-r(s)]^2 \rangle = \frac{4c}{v^3 w} [1 - e^{-v|t-s|}] + \frac{w^2}{v^2} |t-s|$$

L'integrale nella (24b) puo' essere ora facilmente calcolato fornendo una semplice espressione per B:

$$(6.2.36) \quad B = 3c/(vw)$$

Grazie alle quantita' A e B ormai note conosciamo E'; ci rimane da determinare E_1 . Ricordiamo che E_1 e' il livello energetico fondamentale associato all'azione S_1 , e quindi avremo [8]:

$$(6.2.37) \quad E_1 = - \lim_{\beta \rightarrow \infty} \frac{\ln \int D_r \exp\{S_1\}}{\beta}$$

Se differenziamo la (37) rispetto a c mantenendo w costante e ricordiamo la (24b) per B otteniamo

$$(6.2.38) \quad \frac{\partial E_1}{\partial c} = \frac{B}{c}$$

Questa e' una semplice equazione differenziale per E con B dato dalla (36) e con condizioni al contorno tali che per $c=0$ (particella libera) si abbia

[7] R. Feynman, Phys. Rev. 97(1955)660.

[8] T. D. Schulz, "Polarons and excitons", op. cit. pag. 71.

$E = 0$. Integrando la (38) si ricava

$$(6.2.39) \quad E_1 = 3/2 (v-w)$$

L'espressione voluta per E sara' dunque

$$(6.2.40) \quad E = - \frac{3}{4} \frac{(v-w)^2}{v} - A$$

E' chiaro che ora occorre minimizzare E rispetto ai parametri v e w . Analiticamente e' possibile trattare i due casi limite di $\alpha \rightarrow 0$ e di $\alpha \rightarrow \infty$.

Per $\alpha \rightarrow 0$ si trova: $w \rightarrow 3$ e $v/w \rightarrow 1$. Se scegliamo $w=3$ ricaviamo

$$(6.2.41a) \quad E = - \alpha - 1.23 \left(\frac{\alpha}{10}\right)^2$$

Questa espressione e' in accordo al primo ordine con la teoria delle perturbazioni e differisce da questa al secondo ordine per un 3%.

Per grandi α si trova: $w \rightarrow 1$ e $v \approx 4\alpha^2/(9\pi) - (4\ln 2 - 1)$, e quindi

$$(6.2.41b) \quad E = - \frac{\alpha^2}{3\pi} - 3 \ln 2 - 3/4$$

Si noti come, nel limite di α grande, si trovi un andamento del tipo α^2 come gia' dovevamo aspettarci dai risultati del par. 5.1 (vedi eq. (5.1.19)). E' facile inoltre rendersi conto come il risultato qui fornito da' senz'altro un limite piu' accurato di quello stimato nella (5.1.19). Le due espressioni (41a) e (41b) approssimano abbastanza bene l'energia E rispettivamente per $\alpha < 5$ e $\alpha > 5$; ovviamente per ottenere un valore piu' accurato di E occorrerebbe minimizzare numericamente l'espressione (40). La conclusione generale che si puo' trarre da questi risultati finali e' che il metodo variazionale utilizzato lavora uniformemente sull'intero range di α e fornisce una stima dello stato energetico fondamentale migliore di qualsiasi altro metodo.

CAPITOLO 7

TEORIE DI CAMPO MEDIO IN FISICA NUCLEARE

7.1 INTRODUZIONE

La "storia" delle teorie di campo medio nasce con l'intuizione originale di Hartree (riferita a problemi di fisica atomica) che la singola particella di un sistema sia, in qualche modo, influenzata principalmente da una sorta di **potenziale medio** generato dalla distribuzione delle altre particelle del sistema. Evidentemente la dinamica completa del sistema sara' descritta anche in termini di correlazioni a 2,3,...,N particelle, ma

ci si aspetta di poter trattare questi effetti come successive perturbazioni alla soluzione fondamentale di 'potenziale medio'.

Il fatto che un campo medio di singola particella sia il principale responsabile della struttura e della dinamica a basse energie, invece della forte interazione N-N (che e' una correlazione a 2 corpi) descritta in termini di un opportuno potenziale nucleare, puo' essere compreso con qualche ragionamento qualitativo sul libero cammino medio (λ) di una particella del sistema.

La domanda cruciale e': qual e' la relazione tra libero cammino medio e dimensioni del nucleo?

La piu' semplice stima $\lambda \sim (\sigma \rho)^{-1}$ porta, con $\sigma \sim$ (qualche barn), $\rho = 0.17$ N/fm ad una stima di λ dell' ordine di qualche Fermi.

Questa stima grossolana e' qualitativamente e quantitativamente alterata dal ruolo del **principio di Pauli**. Per un singolo nucleone di energia E fuori da una sfera di Fermi con energia E_F , una stima ragionevole di λ e' [1]

$$(7.1.1) \quad \lambda \cong \frac{4}{3 \sigma \rho} \left[\frac{E_F}{E_F - E} \right]^2$$

(con $E_F \sim 40$ MeV). Questa stima porta ad attendersi cammini liberi medi molto maggiori delle dimensioni nucleari a basse energie e percio' motiva, in qualche modo, il ruolo dominante delle teorie di campo medio a basse energie.

7.2 TIME-DEPENDENT HARTREE-FOCK (TDHF)

Introduciamo le caratteristiche essenziali di una teoria di campo medio con una breve derivazione delle equazioni di Hartree-Fock dipendenti dal tempo facendo uso di un principio variazionale.

L'equazione di Schrodinger di un sistema a molti corpi puo' essere derivata da un principio variazionale, richiedendo la stazionarieta' dell'azione

$$(7.2.1) \quad S = \int dt \int d\mathbf{r}_1 \dots d\mathbf{r}_N \{ \psi^*(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N; t) [i\partial_t - H] \psi(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N; t) \}$$

rispetto a variazioni indipendenti di ψ e ψ^* [2].

Per ottenere l'approssimazione TDHF possiamo cercare il minimo di S variando ψ (e ψ^*) non sull'intero spazio di Hilbert, ma solo su un suo sottospazio. Parametriamo cioe' $\psi(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N; t)$ con un determinante di Slater di funzioni ortogonali dipendenti dal tempo

$$(7.2.2) \quad \psi_{SD}(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N; t) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \det\{ \psi_1(\mathbf{r}_1, t) \dots \psi_N(\mathbf{r}_N, t) \}$$

Con queste funzioni d'onda si ha

[1] V. M. Galitskii, Sov. Phys. JEPT 7(1958)104.

[2] A. K. Kerman e S. E. Koonin, Ann. of Phys. 100(1976)332.

$$(7.2.3) \quad S[\psi^*, \psi] = \int dt \langle \psi_{SD}(t) | i\partial_t - \hat{H} | \psi_{SD}(t) \rangle =$$

$$= \int dt \sum_k \int dr \{ \psi_k^*(r, t) i\partial_t \psi_k(r, t) - H[\psi^*, \psi] \}$$

dove :

$$(7.2.4) \quad H[\psi^*, \psi] = \sum_k \int dr \psi_k^*(r, t) T(r) \psi_k(r, t) + \\ + 1/2 \sum_{j,k} \int dr_1 \dots dr_n \psi_j^*(r_1) \psi_k^*(r_2) V(r_1, r_2; r_3, r_4) \psi_k(r_4) \psi_j(r_3)$$

dove $T(r)$ indica l'operatore energia cinetica in rappresentazione posizione e V l'elemento di matrice del potenziale antisimmetrizzato:

$$(7.2.5) \quad V(r_1, r_2; r_3, r_4) = \langle r_1, r_2 | \hat{V} \{ |r_3, r_4\rangle - |r_4, r_3\rangle \}$$

Variando S rispetto a ψ_k^* si ottiene [3]

$$(7.2.6) \quad i\partial_t \psi_k(r, t) = \frac{\delta H}{\delta \psi_k^*} = T(r) \psi_k(r, t) + \\ + \sum_j \int dr_2 dr_3 dr_4 \psi_j^*(r_2) V(r, r_2; r_3, r_4) \psi_j(r_4) \psi_k(r_3)$$

Le equazioni TDHF ora derivate acquistano la veste di una **teoria hamiltoniana classica** con l'hamiltoniana specificata in precedenza.

Bisogna ancora tener presente il fatto che i gradi di liberta' effettivamente presenti nella teoria sono **meno** di quelli specificati dall'insieme delle $\psi_k(r, t)$: infatti ogni trasformazione unitaria tra di esse fornisce lo stesso determinante di Slater. Come e' noto l'invarianza dell'azione rispetto ad una classe di trasformazioni genera, tramite il teorema di Noether, una legge di conservazione. Nel caso dell'invarianza della teoria per trasformazioni unitarie tra le ψ_k si ottiene:

$$(7.2.7) \quad \frac{d}{dt} \int dr \psi_k^*(r, t) \psi_j(r, t) = 0$$

Dunque le assunzioni fatte nella (7.2.2) sull'ortogonalita' delle $\psi_k(r, t)$ (ad ogni t) sono consistenti: basta risolvere il sistema (ai valori iniziali) di equazioni TDHF con condizioni iniziali determinate da un insieme qualunque di $\psi_k(r)$ ortogonali ad un qualunque istante di tempo $t=t_0$.

Si puo' mostrare inoltre che il valor medio di H e di ogni operatore che commuti con H e' una costante del moto.

7.3 SOLUZIONE STAZIONARIA DI HARTREE-FOCK

Se cerchiamo per le $\psi_k(r, t)$ una soluzione della forma

$$(7.3.1) \quad \psi_k(r, t) = \bar{\psi}_k(r) \exp[-iE_k t]$$

le equazioni TDHF si riducono alle usuali equazioni di Hartree-Fock indipendenti dal tempo:

$$(7.3.2) \quad [T + V] \bar{\psi}_k(r) = E_k \bar{\psi}_k(r)$$

[3] P. A. M. Dirac, Proc. Camb. Phys. Soc. 26(1930)376.

con V definito come sopra dalla (7.2.5).

Le equazioni di HF assumono perciò il ruolo di "test di consistenza" sull'esistenza di una soluzione stazionaria per le equazioni dipendenti dal tempo. Inoltre ogni soluzione delle equazioni di HF indipendenti dal tempo può essere trasformata in una soluzione delle equazioni generali TDHF con una trasformazione di Galileo a velocità v [4].

7.4 IL METODO DEL PUNTO SELLA (SPA)

Cio' che è maggiormente carente nell'approccio seguito in precedenza è l'impossibilità di calcolare le correzioni successive all'approssimazione ottenuta: questa è una caratteristica generale dei metodi variazionali. Lo scopo del resto di questo capitolo sarà mostrare che le equazioni TDHF forniscono l'approssimazione di ordine zero di una ben precisa gerarchia di approssimazioni successive.

L'approccio in generale può essere schematizzato in 5 passi:

1) Si seleziona l'osservabile che si vuole valutare: quando (e cioè, in pratica, sempre) solo pochi ordini di correzioni possono essere valutati e bene, per motivi che vedremo, limitarsi al calcolo di valori medi di operatori a 1 o 2 corpi.

2) Si esprime il valor medio dell'operatore scelto in termini dell'operatore di evoluzione temporale del sistema. Poiché quest'ultimo contiene tutta la dinamica questo secondo passo può essere sempre eseguito esattamente. Come esempio si consideri il calcolo del valor medio di un operatore \hat{O} in un (qualunque) autostato di \hat{H} [5]: partiamo dalla quantità $f(E)$

$$\begin{aligned}
 f(E) &= -i \int_0^{\infty} dt \exp\{iEt\} \text{tr}[\hat{O} \hat{U}(t)] = \\
 (7.4.1) \quad &= -i \int_0^{\infty} dt \exp\{iEt\} \sum_n \langle n | \hat{O} \exp(-iE_n t) | n \rangle = \\
 &= \sum_n \langle n | \hat{O} | n \rangle / (E - E_n + i\eta)
 \end{aligned}$$

Dunque la trasformata di Fourier a primo membro presenta poli semplici alle energie esatte di eccitazione del sistema, i cui residui forniscono proprio i valori medi che ci si era prefissi di calcolare.

3) Si rappresenta $\hat{U}(t)$ mediante un integrale funzionale (vedi eq. (3.3.7) e (4.1.5)).

4) Si usa l'approssimazione di punto sella (SPA) nel calcolo dell'integrale funzionale che rappresenta $\hat{U}(t)$. Dell'infinita' di campi che contribuiscono ad $\hat{U}(t)$ la SPA seleziona i "migliori campi" (in genere un insieme numerabile) dai quali ottenere un'approssimazione all'osservabile in questione.

5) Si valutano sistematicamente le correzioni successive (loop-expansion).

Si noti che :

i) la teoria è **esatta** fino al passo 3) **compreso**

ii) non ci sono ambiguita' concernenti, ad esempio, a quali condizioni al contorno debbano soddisfare le equazioni che determinano le soluzioni di ordine piu' basso: la SPA fornisce sia le equazioni del moto, sia le condizioni al contorno.

[4] J. W. Negele, Rev. Mod. Phys. **54**(1982)913.

[5] M. C. Gutzwiller, J. Math. Phys. **8**(1967)1979; **10**(1969)1004; **12**(1971)343.

7.5 APPROSSIMAZIONE SEMICLASSICA (CASO UNIDIMENSIONALE)

Ci interessa, per fare un esempio, determinare lo spettro di una particella in una dimensione, di coordinata q , soggetta al potenziale $V(q)$. Poniamo allora $\hat{O} = \hat{I}$ (operatore identità) nella (7.4.1) ed utilizziamo la consueta rappresentazione di $\hat{U}(t)$ data nel cap. 1.

$$(7.5.1) \quad \text{tr} (E - \hat{H} + i\eta)^{-1} = -i \int_0^{\infty} dt \exp\{iEt\} \int dq \langle q | \exp\{-i\hat{H}t\} | q \rangle = \\ = -i \int_0^{\infty} dt \exp\{iEt\} \int dq [D[q(t)]] \exp\{iS[q(t)]\}$$

dove

$$(7.5.2) \quad S[q(t)] = \int dt \{m\dot{q}^2(t)/2 - V[q(t)]\}$$

La condizione al contorno da usare nel valutare l'integrale funzionale (1) e' evidentemente

$$(7.5.3) \quad q(t) = q(0) = q$$

Calcoliamo ora l'integrale funzionale usando la SPA:

$$(7.5.4) \quad \langle q | \exp\{-i\hat{H}t\} | q \rangle = A \exp\{iS[q_0(t)]\}$$

dove $q(t)$ e' una soluzione delle equazioni di Eulero-Lagrange con le condizioni al contorno (3) ed A e' un coefficiente che tiene conto delle correzioni dovute alle fluttuazioni quantistiche quadratiche attorno a $q_0(t)$. La forma di A e' tuttavia inessenziale nell'attuale ragionamento e pertanto A stessa verra' trascurata da ora in avanti [6].

Vogliamo adesso calcolare l'integrale su q , di nuovo utilizzando la SPA. Dobbiamo pertanto rendere estrema $S[q(t)]$ rispetto a variazioni di q . Notiamo allora che $S[q_0(t)]$ dipende da q tramite le condizioni iniziali delle equazioni del moto e allora, ricordando che

$$(7.5.5) \quad \frac{\partial S}{\partial q_i} = p_i$$

la stazionarieta' di $S[q(t)]$ rispetto a q richiede:

$$(7.5.6) \quad \frac{dS}{dq} = - \left\{ \frac{\partial S[q_0]}{\partial q(0)} - \frac{\partial S[q_0]}{\partial q(t)} \right\} = p(0) - p(t) = 0$$

e pertanto:

$$(7.5.7) \quad \text{tr} [E - \hat{H} + i\eta]^{-1} = -i \int_0^{\infty} dT \exp\{iET + S(T)\}$$

dove $S(T)$ e' l'azione classica per una qualunque traiettoria periodica (sia nelle coordinate, sia negli impulsi), di periodo T .

Ricordiamo ora che l'equazione di Hamilton-Jacobi richiede

$$(7.5.8) \quad \frac{\partial S}{\partial t} = -E$$

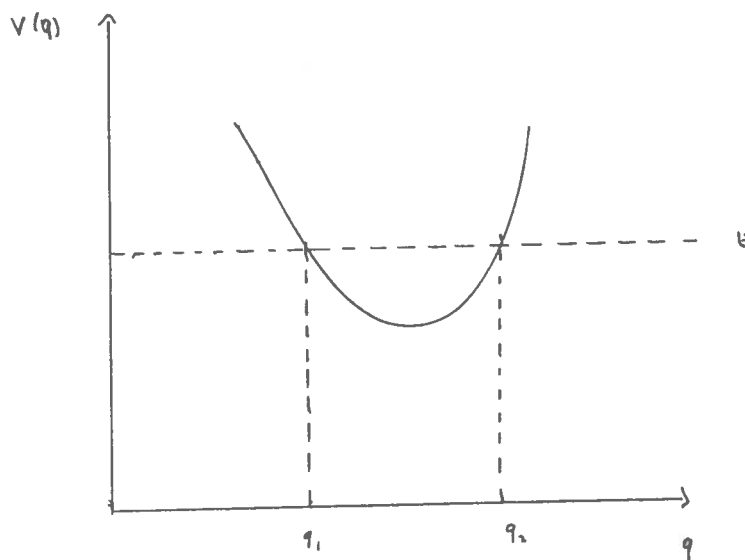
e pertanto l'approssimazione SPA sull'integrale (7) fornisce

[6] Un calcolo dettagliato di A si trova in S. Coleman, "The Use of Instantons", Proceeding of the XV International School of Subnuclear Physics, ed. da A. Zichichi (Plenum Press, New York (1979)).

$$(7.5.9) \quad E = - \frac{\partial S[q_0]}{\partial T} = E(T)$$

cioe' tra tutti i cammini periodici danno contributo solamente quelli i cui periodi soddisfino la (9).

Consideriamo ora un potenziale come in figura



I cammini che contribuiscono sono evidentemente tutti quelli che partono ed arrivano in q_1 facendo un numero qualunque di volte il percorso $q_1 - q_2 - q_1$; poniamo

$$(7.5.10) \quad T(E) = 2 \int_{q_1}^{q_2} dt = 2 \int_{q_1}^{q_2} dq \{m/[E-V(q)]\}^{1/2}$$

Ovviamente tutte le traiettorie con periodo multiplo

$$(7.5.11) \quad T_m = m T(E)$$

con m intero positivo soddisfano la (9). Otteniamo allora:

$$(7.5.12) \quad \begin{aligned} \text{tr} [E - \hat{H} + i\eta]^{-1} &= -i \sum_m \exp\{iWCT_m\} \\ WCT_m &= E T_m + \int_0^{T_m} dt \{m\dot{q}_0^2(t)/2 - V[q_0(t)]\} = \\ &= E T_m + \int_0^{T_m} dt \{p(t)\dot{q}(t) - H\} = m WCT(E) \end{aligned}$$

dove

$$(7.5.13) \quad \begin{aligned} WCT(E) &= E T(E) + \int_0^{T(E)} dt \{p(t)\dot{q}(t) - H\} = \\ &= \int_0^{T(E)} p(t)\dot{q}(t) dt = \oint_E p dq \end{aligned}$$

e in definitiva

$$(7.5.14) \quad \begin{aligned} \text{tr} [E - \hat{H} + i\eta]^{-1} &= -i \sum_m \exp\{iWCT(E)\}^m = \\ &= -i \exp\{iWCT(E)\} / [1 - \exp\{iWCT(E)\}] \end{aligned}$$

funzione che presenta manifestamente poli a tutte le energie E che

soddisfino alla regola di quantizzazione

$$(7.5.15) \quad 2n\pi = \text{WCT}(E) = \oint_{\mathcal{E}} pdq$$

Il calcolo delle correzioni quadratiche alla SPA nell'integrale su T porta in realta' a correggere quest'ultimo risultato in

$$(7.5.16) \quad (2n+1)\pi = \oint pdq$$

Ci sono complicazioni addizionali se il potenziale $V(q)$ ha piu' di un minimo (ad esempio 2): la SPA richiede di sommare su **tutti i contributi di tutti i punti di stazionarieta' isolati nel piano complesso T** . Pertanto i cammini che contribuiscono all'approssimazione di ordine piu' basso non consistono solamente dei cammini classici periodici in ciascuna delle due buche di potenziale, ma anche di tutti i cammini (periodici) a periodo immaginario puro nella **zona classicamente proibita**. Tener conto anche di questi effetti significa tener conto del fatto che tra due buche di potenziale separate da una barriera finita e' possibile l'**effetto tunnel quantistico**, e che (come e' ovvio) i livelli non sono quelli "imperturbati" di due buche isolate. E' importante notare che questi effetti sono incorporati (almeno in parte) gia' nell'approssimazione di ordine piu' basso.

Come esempio tipico dei risultati che si ottengono con questo metodo (all'ordine piu' basso), c'e' l'espressione in approssimazione WKB dello splitting di due livelli quasi degeneri in due buche di potenziale separate da una barriera [7].

7.6 APPLICAZIONI A PROBLEMI A MOLTI CORPI

Dopo aver inquadrato lo spirito delle approssimazioni di campo medio in sistemi semplici, siamo ora in grado di passare alla formulazione generale del problema in un sistema a molti corpi che assumiamo descritto da una hamiltoniana del tipo

$$(7.6.1) \quad \hat{H} = \int dr_1 dr_2 \hat{\psi}^+(r_1) T(r_1, r_2) \hat{\psi}(r) + \\ + 1/2 \int dr_1 dr_2 dr_3 dr_4 \hat{\psi}^+(r_1) \hat{\psi}^+(r_2) V(r_1, r_2; r_3, r_4) \hat{\psi}(r_4) \hat{\psi}(r_3)$$

Il caso locale corrisponde a $V(r_1, r_2; r_3, r_4) = \delta(r_1 - r_3) \delta(r_2 - r_4) V(|r_1 - r_2|)$.

La dinamica del sistema e' descritta dall'operatore di evoluzione temporale

$$(7.6.2) \quad \hat{U}(t_f - t_i) = \exp\{-i\hat{H}(t_f - t_i)\}$$

Il kernel di \hat{U} in rappresentazione olomorfa e' stato gia' descritto nei capp. 3 e 4 (eq. (3.3.7) e (4.1.5)):

$$(7.6.3) \quad U(t_f - t_i, \psi^*, \psi) = \\ \int D\psi^* D\psi \exp\{1/2 \int dr [\psi^*(r, t_f) \psi(r, t_f) + \psi^*(r, t_i) \psi(r, t_i)] \\ \exp\{i \int_{t_i}^{t_f} dt [\int dr \psi^*(r, t) i\partial_t \psi(r, t) - h[\psi^*, \psi]]\}$$

dove h si ottiene dalla (1) sostituendo gli operatori $\hat{\psi}^+$ e $\hat{\psi}$ con le variabili olomorfe ψ^* e ψ :

[7] S. Levit, J. W. Negele e Z. Paltiel, Phys. Rev. C22(1980)1979.

$$(7.6.4) \quad h[\psi^*, \psi] = \int dr_1 dr_2 \psi^*(r_1) T(r_1, r_2) \psi(r_2) + \\ + 1/2 \int dr_1 dr_2 dr_3 dr_4 \psi^*(r_1) \psi^*(r_2) V(r_1, r_2; r_3, r_4) \psi(r_3) \psi(r_4)$$

Se φ_i e φ_f sono le funzioni d'onda degli stati $|i\rangle$ e $|f\rangle$, tali stati nella rappresentazione olomorfa saranno descritti da

$$\phi_i[\psi_i^*] = \int \varphi_i(r_1, \dots, r_n) \psi_i^*(r_1) \dots \psi_i^*(r_n) dr_1 \dots dr_n \\ \phi_f[\psi_f^*] = \int \varphi_f(r_1, \dots, r_n) \psi_f^*(r_1) \dots \psi_f^*(r_n) dr_1 \dots dr_n$$

e gli elementi di matrice di \hat{U} si ottengono da

$$(7.6.5) \quad \langle f | \hat{U}(t_f - t_i) | i \rangle = \int D\psi^* D\psi \int D\psi_f^* D\psi_f \int D\psi_i^* D\psi_i \\ (\phi_f[\psi_f^*])^* \exp\{-\int dr \psi^*(r, t_f) \psi(r)\} U(t_f - t_i, \psi^*, \psi) \\ \exp\{-\int dr \psi^*(r) \psi(r, t_i)\} \phi_i[\psi_i^*]$$

Evidentemente la presenza in h del termine quadrilineare V preclude il calcolo diretto dell'integrale funzionale; procediamo perciò a riscrivere tale termine mediante un trucco standard, equivalente nella sostanza alla trasformazione di Hubbard-Stratonovich. Si verifica facilmente che vale l'identità

$$(7.6.6) \quad \exp\{-i/2 \int dt \int dr_1 \dots dr_4 \\ \psi^*(r_1, t) \psi^*(r_2, t) V(r_1, r_2; r_3, r_4) \psi(r_3, t) \psi(r_4, t)\} = \\ = [\det V]^{1/2} \int D\rho \exp\{i/2 \int dt \int dr_1 \dots dr_4 \\ [\rho(r_1, r_3, t) V(r_1, r_2; r_3, r_4) \rho(r_2, r_4, t) - h_p[\psi^*, \psi]]\}$$

dove:

$$(7.6.7) \quad h_p[\psi^*, \psi] = \int dr_1 dr_3 \cdot \\ \cdot [T(r_1, r_3) + \int dr_2 dr_4 V(r_1, r_2; r_3, r_4) \rho(r_2, r_4, t)] \psi^*(r_1, t) \psi(r_3, t)$$

E' facile infatti riconoscere che l'integrale su ρ e' gaussiano e quindi puo' essere fatto esplicitamente. Si noti che h_p dipende dal tempo attraverso la ρ . Introducendo una ovvia notazione matriciale otteniamo:

$$(7.6.8) \quad \langle f | \hat{U}(t_f - t_i) | i \rangle = \int D\rho \exp\{i/2 \int dt \rho V \rho\} \\ [\det V]^{1/2} \int D\psi^* D\psi (\phi_f[\psi_f^*])^* \exp\{-\int dr \psi^*(r, t_f) \psi(r) + \int dr \psi^*(r, t_i) \psi(r, t_i)/2\} \\ \exp\{i \int dt [\int dr \psi^*(r, t) i \partial_t \psi(r, t) - h_p[\psi^*, \psi]]\} \\ \exp\{-\int dr \psi^*(r) \psi(r, t_i) + \int dr \psi^*(r, t_f) \psi(r, t_f)/2\} \\ = [\det V]^{1/2} \int D\rho \exp\{i/2 \int dt \rho V \rho\} \langle f | \hat{U}_p(t_f - t_i) | i \rangle$$

ove \hat{U}_p e' un "evolutore temporale efficace" il cui kernel in rappresentazione olomorfa e' descritto (a parte la dipendenza dalle condizioni al contorno, che coincide esattamente con quella di \hat{U}) da

$$(7.6.9) \quad U_p(t_f - t_i, \psi^*, \psi) = \exp\{i \int dt [\int dr \psi^*(r, t) i \partial_t \psi(r, t) - h_p[\psi^*, \psi]]\}$$

L'operatore nello spazio di Hilbert astratto e' naturalmente

$$(7.6.10) \quad \hat{U}_p(t_f - t_i) = T \exp\{-i \int dt \hat{h}_p\}$$

con \hat{h}_p definita da

$$(7.6.11) \quad \hat{h}_p(t) = \int dr_1 dr_2 \left[T(r_1, r_2) + \int dr_3 dr_4 V(r_1, r_2; r_3, r_4) \rho(r_3, r_4, t) \right] \hat{\psi}^+(r_1, t) \hat{\psi}(r_2, t)$$

In forma operatoriale la (8) allora diviene

$$(7.6.12) \quad \hat{U}(t_f - t_i) = [\det V]^{1/2} \int D\rho \exp\{i/2 \int dt \rho(t) V \rho(t)\} \hat{U}_p(t_f - t_i)$$

E' doveroso sottolineare che l'espressione (12) e' esatta e che l'evoluzione temporale del sistema di many-body e' simulata dall'evoluzione di infiniti sistemi a particelle indipendenti (ognuno determinato da una specifica configurazione $\rho(r, r', t)$ del campo ausiliario), ciascuno 'pesato' dal fattore $\exp\{-i/2 \rho V \rho\}$.

Ci serviamo delle formule precedenti per calcolare la traccia di \hat{U} calcolato sull'intervallo $[-T/2, T/2]$:

$$(7.6.13) \quad \text{tr } \hat{U}(T) = [\det V]^{1/2} \sum_n \int D\rho \exp\{i/2 \int dt \rho(t) V \rho(t)\} \langle n | \text{Texp}\{-i \int_{-T/2}^{T/2} \hat{h}_p(t) dt\} | n \rangle$$

Osserviamo che si puo' anche scrivere tale espressione introducendo una opportuna azione efficace $S_n[\rho]$:

$$(7.6.14) \quad \text{Tr } \hat{U}(T) = [\det V]^{1/2} \sum_n \int D\rho \exp\{i S_n[\rho]\}$$

con

$$(7.6.15) \quad S_n[\rho] = 1/2 \int_{-T/2}^{T/2} dt \rho V \rho - i \ln \langle n | \text{Texp}\{-i \int_{-T/2}^{T/2} \hat{h}_p(t) dt\} | n \rangle$$

Naturalmente S_n non e' ben definita fintantoche' non si sia specificato il set completo di stati $\{|n\rangle\}$ che interviene nella (14) e nella (15)

Introduciamo allora un insieme $\{\psi_n(r, t)\}$ di funzioni d'onda di particella singola che evolvano secondo l'hamiltoniana $\hat{h}_p(t)$ e che siano autostati dell'operatore di evoluzione temporale tra $T/2$ e $-T/2$. Se cioe' indichiamo con $|r\rangle$ gli stati dello spazio di Hilbert di particella singola a posizione definita:

$$|r\rangle = \hat{\psi}^+(r) |0\rangle$$

il nostro set di stati di base sara' descritto dalle equazioni

$$(7.6.16) \quad \psi_n(r, t) = \int dr' \langle r | \text{Texp}\{-i \int_{-T/2}^t dt' \hat{h}_p(t')\} | r' \rangle \psi_n(r', -T/2)$$

$$(7.6.17) \quad \psi_n(r, T/2) = \int dr' \langle r | \text{Texp}\{-i \int_{-T/2}^{T/2} dt' \hat{h}_p(t')\} | r' \rangle \psi_n(r', -T/2) = \exp\{-i \alpha_n(\rho, T)\} \psi_n(r, -T/2)$$

Gli autovalori sono stati posti nella forma $\exp\{-i \alpha_n\}$ perche' se \hat{U}_p e' unitario [8] le α_n sono reali. Vedremo in seguito che le quantita' α_n/T giocheranno il ruolo di energie di particella singola. Naturalmente l'unitarieta' di \hat{U}_p implica anche che le $\{\psi_n(r, -T/2)\}$ formano una base completa e ortogonale (o perlomeno ortogonalizzabile) sullo spazio di particella singola e seguendo la traccia del par. 1 si puo' mostrare che tale proprieta' si conserva nel tempo. Si noti infine che il set di

[8] Naturalmente \hat{U}_p e' effettivamente unitario. La cosa pero' non e' ovvia a priori, come per \hat{U} , a causa della dipendenza esplicita dal tempo dell'hamiltoniana efficace da cui e' dedotto.

funzioni d'onda di particella singola $\{\psi_k(r,t)\}$ e' parametrizzato (cioe' dipende funzionalmente) da ρ .

Detto cio', stabiliamo di costruire gli stati $|n\rangle$ nella forma di determinanti di Slater formati dalle $\psi_k(r,t)$ ed infine calcoliamo l'integrale funzionale su ρ utilizzando la SPA.

Il primo problema e' quello di costruire il campo medio che minimizza l'azione efficace $S_n[\rho]$. Minimizzare S_n porta all'equazione

$$(7.6.18) \quad \frac{\delta S_n[\rho]}{\delta \rho(r,r',t)} = \int dr_1 dr_2 V(r_1, r; r_2, r') \rho(r_1, r_2, t) + \frac{\langle n | \hat{U}_\rho(T/2-t) \int dr_1 dr_2 V(r_1, r, r_2, r') \hat{\psi}^+(r_1, t) \hat{\psi}(r_2, t) \hat{U}_\rho(t - (-T/2)) | n \rangle}{\langle n | \hat{U}_\rho(T) | n \rangle} = 0$$

dopodiche' si deve invertire V per ottenere

$$(7.6.19) \quad \rho_0(r, r', t) = \frac{\langle n | \hat{U}_\rho(T/2-t) \hat{\psi}^+(r, t) \hat{\psi}(r', t) \hat{U}_\rho(t - (-T/2)) | n \rangle}{\langle n | \hat{U}_\rho(T) | n \rangle} = \sum_{\{k\}} \psi_k^*(r, t) \psi_k(r', t)$$

L'ultimo passaggio e' evidente se si ricorda la definizione data delle funzioni d'onda di particella singola e degli stati $|n\rangle$. Con $\{k\}$ qui e in seguito si denota l'insieme degli orbitali di particella singola che individuano lo stato $|n\rangle$. E' da notare pero' che cio' funziona nel caso che V sia completamente non locale, nel qual caso e' effettivamente invertibile nel senso richiesto dalla (18). Nel caso di potenziale locale pero' e' immediato scoprire che l'integrale V_ρ si riduce a

$$\int dr' V(|r-r'|) \rho(r', r', t)$$

e che di conseguenza solo la parte diagonale della ρ interviene nella (18). Di conseguenza anche la validita' della (19) sara' limitata alla sola parte diagonale $r = r'$. Naturalmente questo svantaggio e' compensato dal fatto che nel caso di potenziale locale anche \hat{h}_ρ e \hat{U}_ρ sono diagonali in rappresentazione posizione e che di conseguenza solo la parte diagonale di ρ ci interessa nei calcoli. Casi analoghi sono potenziali antilocali e simili.

E' poi facile verificare che:

$$(7.6.20) \quad \langle n | T \exp[-i \int_{-T/2}^{T/2} dt \hat{h}_\rho(t)] | n \rangle = \exp[-i \sum_{\{k\}} \alpha_k(\rho_0, T)]$$

Ovviamente le $\psi_k(r, t)$ soddisfano a

$$(7.6.21) \quad i \partial_t \psi_k(r, t) = \int dr' (r | \hat{h}_\rho(t) | r') \psi_k(r', t)$$

ovvero ad un sistema di equazioni self-consistenti tipo Hartree dipendente dal tempo. Conviene ora definire delle nuove funzioni $\phi_k(r, t)$

$$(7.6.22) \quad \phi_k(r, t) = \exp\{i \alpha_k(\rho_0, T) t/T\} \psi_k(r, t)$$

che soddisfano a:

$$(7.6.23a) \quad (i \partial_t - h_{\rho_0}(t)) \phi_k(t) = - \alpha_k(\rho_0, T)/T \phi_k(t)$$

$$(7.6.23b) \quad \phi_k(r, T/2) = \phi_k(r, -T/2)$$

Le soluzioni periodiche (23) sono le analoghe nel problema a molti corpi delle orbite classiche periodiche del problema con un grado di liberta'. La differenza sostanziale sta nel fatto che la presenza delle altre particelle nel sistema innesca, col tramite del campo medio ρ , un meccanismo di self-consistenza del tutto assente nel caso ad 1 grado di liberta'.

E' altresì chiaro che dovremmo trovare tutte le possibili soluzioni al sistema di equazioni (20); concentriamoci, a scopo esplicativo, su una particolare classe di soluzioni: quelle indipendenti dal tempo:

$$(7.6.24) \quad \psi_k(r, t) = \psi_k(r)$$

In questo caso la ρ_0 perde la sua dipendenza dal tempo, di conseguenza anche \hat{h}_{ρ_0} diviene costante e il sistema di equazioni si riduce al ben noto sistema di equazioni di Hartree self-consistenti:

$$(7.6.25) \quad \int dr' (r | \hat{h}_{\rho_0} | r') \psi_k(r') = \alpha_k(\rho_0, T) / T \psi_k(r)$$

con

$$(7.6.26) \quad (r | \hat{h}_{\rho_0} | r') = T(r) \delta(r-r') + \int dr_1 dr_2 V(r_1, r; r_2, r') \sum_{\{k\}} \psi_k^*(r_1) \psi_k(r_2)$$

che nel caso locale diventa diagonale e si riduce a

$$(7.6.27) \quad h_{\rho_0}(r) = T(r) + \int dr' V(|r-r'|) \sum_{\{k\}} |\psi_k(r')|^2$$

Moltiplicando per $\psi_k^*(r)$ e integrando si ha:

$$(7.6.28) \quad \alpha_j / T = \langle j | T | j \rangle + \sum_{\{k\}} \langle jk | V | jk \rangle$$

e notando che

$$(7.6.29) \quad \int dt \rho_0 V \rho_0 = T \sum_{\{jk\}} \langle jk | V | jk \rangle$$

si ottiene subito

$$(7.6.30) \quad S_n[\rho_0] = T/2 \sum_{\{jk\}} \langle jk | V | jk \rangle - \sum_{\{k\}} \alpha_k = -T E_H^n$$

dove E_H^n e' l'energia di Hartree dello stato $|n\rangle$ Percio' all'ordine piu' basso:

$$(7.6.31) \quad \text{tr } \hat{U}(T) = \sum_n \exp\{-iT E_H^n\} \\ -i \int_0^T dT \exp\{iT E\} \text{tr } \hat{U}(T/2 - (-T/2)) = \sum_n 1/(E - E_H^n + i\eta)$$

In questa approssimazione gli autostati del sistema sono determinanti di Slater di $\psi_k(r, t)$, ognuno con associata un'energia che e' proprio l'energia di Hartree di quel particolare stato.

Alcuni commenti:

1) La derivazione qui data, sebbene simile a quella originale di Negele [9] elimina fin dal principio il fattore $1/2V(0)$ nella definizione dell'energia cinetica che da' abbastanza fastidio (anche se poi scomparirebbe col calcolo delle correzioni quadratiche): infatti includerlo modifica non solo l'espressione per i livelli energetici, ma la base stessa di autofunzioni su cui sono calcolati gli elementi di matrice.

2) Si noti che le equazioni qui dedotte sono piu' generali di quelle di Hartree introdotte variazionalmente. Infatti ovunque ci siamo portati

[9] J. W. Negele, Rev. Mod. Phys 54(1982)913.

appresso l'indice n che denota il generico autostato a particelle indipendenti, mentre il problema variazionale e' riferito per definizione al solo stato fondamentale.

3) Sebbene le funzioni d'onda siano antisimmetrizzate correttamente, manca completamente il termine di Fock.

7.7 CORREZIONI QUADRATICHE ALLA SPA

Le correzioni quadratiche alla SPA si ottengono sviluppando i cammini nel path integral intorno alla soluzione classica. I termini lineari si annullano a causa della condizione di minimo che determina la soluzione classica e i termini quadratici danno luogo a un integrale gaussiano che sappiamo calcolare con le formule standard. E' facile rendersi conto che la (7.6.31) diviene

$$(7.7.1) \quad \text{Tr } \hat{U}(T) = \sum_n A_n \exp\{-iT E_n^n\}$$

ove i fattori correttivi A_n sono definiti come

$$(7.7.2) \quad A_n = \left\{ \frac{\det V}{\det \frac{\delta^2 S_n}{\delta \rho(t) \delta \rho(t')}} \right\}^{1/2}$$

ove si sono trascurate tutte le dipendenze da r per alleggerire la notazione. Con un calcolo diretto si ottiene (simbolicamente)

$$(7.7.3) \quad \frac{\delta^2 S_n}{\delta \rho(t) \delta \rho(t')} = V (1 - D^n V)$$

con

$$(7.7.4) \quad D^n(t, t') = \langle \hat{\rho}(t) \hat{\rho}(t') \rangle_n - \langle \hat{\rho}(t) \rangle_n \langle \hat{\rho}(t') \rangle_n$$

$\hat{\rho}(t)$ essendo l'operatore

$$(7.7.5) \quad \hat{\rho} = \hat{\psi}^\dagger(r) \hat{\psi}(r')$$

e la media di un operatore sullo stato $|n\rangle$ essendo definita come

$$(7.7.6) \quad \langle \hat{O}(t) \rangle = \frac{\langle n | T \exp[-i \int_{-T/2}^t dt \hat{h}_\rho] \hat{O} \exp[-i \int_t^{T/2} dt \hat{h}_\rho] | n \rangle}{\langle n | T \exp[-i \int_{-T/2}^{T/2} dt \hat{h}_\rho] | n \rangle}$$

Si noti che

$$(7.7.7) \quad \langle \hat{\rho}(t) \rangle_n = \sum_{\{k\}} \psi_k^*(r, t) \psi_k(r', t) = \rho_0(r, r', t)$$

il che giustifica l'apparente abuso di notazioni.

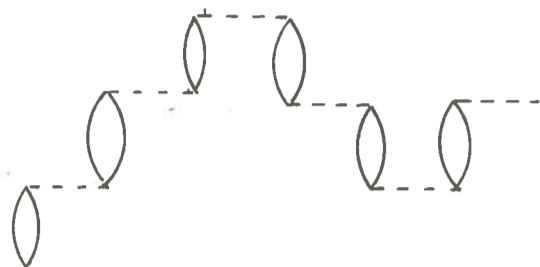
Nel caso in cui il campo medio non dipenda dal tempo $D^n(t, t')$ calcolato sullo stato fondamentale si riduce all'usuale propagatore di polarizzazione in approssimazione di Hartree. Si noti che in materia nucleare infinita questo coincide con la funzione di Lindhard Π , mentre per un nucleo finito il campo self-consistente permette di confinare il sistema. In questo caso:

$$(7.7.8) \quad A_0 = \det [1 - D^0 V] = \exp\{-1/2 \operatorname{tr} \ln (1 - D^0 V)\} = \\ = \exp\{1/2 \sum_n 1/n \operatorname{tr} (D^0 V)^n\}$$

Il termine con $n=1$ e' l'usuale termine di Fock, rappresentabile diagrammaticamente con



mentre il termine generico $(D^0 V)^n$ e' rappresentato da diagrammi del tipo



La traccia in (8) forza la catena a richiudersi su stessa: quello che si ottiene e' quindi la somma dei 'ring diagrams', con il fattore $1/n$ a tenere in conto la molteplicita' del diagramma.

Si noti che le correzioni quadratiche ristabiliscono, all'ordine minimo ($n=1$), la corretta forma di Hartree-Fock dell'energia, ma calcolata su una base sbagliata (le $\psi_k(r,t)$ soddisfano all'equazione self-consistente di Hartree solamente).

La completa assenza di un termine di Fock nelle equazioni per il campo medio deriva da una arbitrarieta' nella effettuare la trasformazione di Hubbard-Stratonovich. Cio' che e' stato fatto in pratica nella (6) e' stato riscrivere il termine di interazione come

$$\psi^*(r_1) \psi(r_2) V(r_1, r_2; r_3, r_4) \psi^*(r_2) \psi(r_4)$$

e poi di sostituire (a prezzo di un integrale funzionale) $\psi^*(r_1) \psi(r_2)$ con $\beta(r_1, r_2)$ e $\psi^*(r_2) \psi(r_4)$ con $\beta(r_2, r_4)$ (trascuriamo gli indici temporali per alleggerire la notazione). Il punto rilevante e' che avremmo potuto riscrivere il termine di interazione come

$$-\psi^*(r_1) \psi(r_4) V(r_1, r_2; r_3, r_4) \psi^*(r_2) \psi(r_3)$$

Allora ci saremmo accorti che nel caso semplice di potenziale locale (e facciamo questo esempio per ovvie ragioni di semplicita') l'hamiltoniana efficace di particella singola sarebbe stata

$$(7.7.9) \quad \hat{h}_j(t) = \int dr_1 dr_2 [T(r_1, r_2) + V(|r_1 - r_2|)] \beta(r_1, r_2) \hat{\psi}^\dagger(r_1) \hat{\psi}(r_2)$$

il che mostra appieno come una simile procedura avrebbe fatto intervenire la parte non diagonale di β .

Per introdurre dunque il termine di Fock bisognera' allora spaccare artificialmente V in $V=v^0 + v^E$ in modo che il termine di Fock di v^0 sia nullo, cosi' come il termine di Hartree di v^E ; ad esempio in materia nucleare infinita, e con un potenziale $V=v_0 + v_1 \sigma_1 \sigma_2$, la spaccatura giusta e'

$$v^0 = (1 - 1/3 \sigma_1 \cdot \sigma_2) v_0$$

(7.7.10)

$$v^E = (v_1 + 1/3 v_0) \sigma_1 \cdot \sigma_2$$

E' immediato vedere che il termine diretto di v^E e' nullo, essendo $\text{tr } \sigma = 0$. Ma anche il termine di scambio di v^D e' nullo [10]. Percio', fatta questa spaccatura, si ottiene HF introducendo due campi ausiliari nei modi predetti ed applicando ad entrambi il metodo SPA.

7.8 CORREZIONI DI ORDINE SUPERIORE (LOOP-EXPANSION)

Volendo procedere al di la' delle correzioni quadratiche dobbiamo sviluppare in serie di Volterra S_n intorno alla configurazione β_0 determinata in precedenza. Assumiamo per alleggerire i calcoli che il potenziale sia locale che quindi sia funzione solo di r e t (indicati per semplicita' col 4-vettore x) e definiamo per comodita'

$$(7.8.1) \quad \delta^k S_n(x_1, \dots, x_k) = \frac{\delta^k S_n}{\delta \beta(x_1) \dots \delta \beta(x_k)} \Big|_{\beta = \beta_0}$$

Si ha allora:

$$(7.8.2) \quad \int D\beta \exp\{iS_n[\beta]\} = \int D\eta \exp\{i(S_n[\beta_0] + \sum_{k=2}^{\infty} \frac{1}{k!} \int dx_1 \dots dx_k \delta^k S_n(x_1, \dots, x_k) \eta(x_1) \dots \eta(x_k))\}$$

con $\beta = \beta_0 + \eta$. Il termine di ordine 0 naturalmente puo' essere estratto dall'integrale e resta una serie di potenze di η in cui il termine quadratico puo' essere riguardato come teoria libera mentre quelli con $k \geq 3$ possono essere reinterpretati come potenziali. Usando la (4.4.11) si ottiene facilmente

$$(7.8.2) \quad \int D\beta \exp\{iS_n[\beta]\} = \exp\{iS_n[\beta_0]\}$$

$$\exp \left\{ \sum_{k=3}^{\infty} \frac{1}{k!} \int dx_1 \dots dx_k \frac{i\delta}{\delta J(x_1)} \dots \frac{i\delta}{\delta J(x_k)} \delta^k S_n(x_1, \dots, x_k) \right\}$$

$$\int D\eta \exp\{i/2 \int dx \int dy \eta(x) [\delta^2 S_n(x, y)] \eta(y) + \int dx \eta(x) J(x)\} \Big|_{J=0}$$

L'ultimo integrale funzionale rimasto si calcola esplicitamente, e si ottiene

$$(7.8.3) \quad \int D\beta \exp\{iS_n[\beta]\} = \exp\{iS_n[\beta_0]\} [\det \delta^2 S_n]^{-1/2}$$

$$\exp \left\{ \sum_{k=3}^{\infty} \frac{1}{k!} \int dx_1 \dots dx_k \frac{i\delta}{\delta J(x_1)} \dots \frac{i\delta}{\delta J(x_k)} \delta^k S_n(x_1, \dots, x_k) \right\}$$

[10] Si veda ad es. A. L. Fetter e J. D. Walecka, "Quantum Theory of Many-Particle Systems" McGraw-Hill N. Y. (1971) a pag 104 (eq. 9.24)

$$\exp\{i/2 \int dx dy J(x) [\delta^2 S_n(x,y)]^{-1} J(y)\} \Big|_{J=0}$$

Si dimostra poi facilmente che:

$$(7.8.4) \quad i^k \delta^k S_n(x_1, \dots, x_k) = (-i)^k \int dx'_1 \dots dx'_k V(x_1 - x'_1) \dots V(x_k - x'_k) \langle T\{\hat{\psi}(x'_1) \dots \hat{\psi}(x'_k)\} \rangle$$

Reinserendo la (4) nella (3) e tenendo conto del fatto che

$$(7.8.5) \quad \delta^2 S_n = [V(1-D^n V)]$$

ci si accorge subito che la caratteristica dei diagrammi generati dallo sviluppo (4) e' di essere diagrammi con loops fermionici chiusi, con i vari punti x'_1, \dots, x'_k connessi da linee

$$(7.8.6) \quad V(1-D^n V)^{-1} = \sum_k V(D^n V)^k$$

in tutti i modi possibili. Il numero di linee (6) presenti in un diagramma ne determina l'ordine nella gerarchia delle correzioni alla teoria di campo medio.

CAPITOLO 8

CORRENTI DI SCAMBIO

8.1 IL TEOREMA DI NOETHER

Sia L una lagrangiana che dipende da un set di campi $\phi_i (i=1, \dots, N)$ e dalle loro derivate $\partial_\mu \phi_i$. Assumiamo che L sia invariante rispetto a un gruppo di simmetria a n parametri. Richiediamo cioe' che L sia invariante rispetto a una trasformazione infinitesima

$$(8.1.1) \quad \phi_i \xrightarrow{T} \phi'_i = \phi_i + \Lambda_j F_{ij}[\phi_1, \dots, \phi_N]$$

ove le $\Lambda_j (j=1, \dots, n)$ sono i parametri infinitesimi della trasformazione. La teoria dei gruppi ci assicura poi che se L e' invariante rispetto a ogni trasformazione infinitesima lo sara' anche rispetto alle trasformazioni finite.

Fintantoche' le Λ_j sono costanti (cioe' indipendenti da x) la trasformazione si dice **globale** e la proprieta' di invarianza dicesi **invarianza globale**. L'ipotesi di partenza e' che L sia invariante rispetto a tutte le trasformazioni globali T.

Definiamo una trasformazione **locale** (di gauge) come

$$(8.1.2) \quad \phi_i(x) \xrightarrow{T(x)} \phi'_i(x) = \phi_i(x) + \Lambda_j(x) F_{ij}[\phi_1, \dots, \phi_N]$$

Si osserva che, nelle nostre ipotesi, questa trasformazione non lascia in generale invariante L. La costruzione esplicita della variazione δL ci permettera' di individuare una corrente conservata. Si ha

$$(8.1.3) \quad \delta L = L' - L = \int \frac{\delta L}{\delta \phi_i} \delta \phi_i dx + \int \frac{\delta L}{\delta(\partial_\mu \phi_i)} \delta(\partial_\mu \phi_i) dx$$

ove

$$(8.1.4) \quad \delta \phi_i = \Lambda_j F_{ij}$$

$$(8.1.5) \quad \delta(\partial_\mu \phi_i) = (\partial_\mu \Lambda_j) F_{ij} + \Lambda_j \partial_\mu F_{ij}$$

Naturalmente e' il primo termine della (5) quello che, in definitiva, rendera' non nulla la variazione di L:

$$(8.1.6) \quad \delta L = \int \frac{\delta L}{\delta \phi_i} \Lambda_j F_{ij} dx + \int \frac{\delta L}{\delta(\partial_\mu \phi_i)} (\partial_\mu \Lambda_j F_{ij} + \Lambda_j \partial_\mu F_{ij}) dx$$

Del resto e' ovvio che per trasformazioni infinitesime

$$(8.1.7) \quad \delta L = \int \frac{\delta(\delta L)}{\delta \Lambda_j} \Lambda_j dx + \int \frac{\delta(\delta L)}{\delta(\partial_\mu \Lambda_j)} \partial_\mu \Lambda_j dx$$

Identificando le variazioni (cioe' derivando funzionalmente rispetto a Λ_j e $\partial_\mu \Lambda_j$ i secondi termini della (6) e della (7)) si ottiene

$$(8.1.8) \quad \frac{\delta L}{\delta \phi_i} F_{ij} + \frac{\delta L}{\delta(\partial_\mu \phi_i)} \partial_\mu F_{ij} = \frac{\delta(\delta L)}{\delta \Lambda_j}$$

$$(8.1.9) \quad \frac{\delta L}{\delta(\partial_\mu \phi_i)} F_{ij} = \frac{\delta(\delta L)}{\delta(\partial_\mu \Lambda_j)}$$

Derivando la (9) ed usando le equazioni del moto si ottiene

$$\partial_\mu \frac{\delta(\delta L)}{\delta(\partial_\mu \Lambda_j)} = \partial_\mu \frac{\delta L}{\delta(\partial_\mu \phi_i)} F_{ij} + \frac{\delta L}{\delta(\partial_\mu \phi_i)} \partial_\mu F_{ij} =$$

(8.1.10)

$$= \frac{\delta L}{\delta \phi_i} F_{ij} + \frac{\delta L}{\delta(\partial_\mu \phi_i)} \partial_\mu F_{ij} = \frac{\delta(\delta L)}{\delta \Lambda_j}$$

Se L e' invariante rispetto alla trasformazione globale, deve essere

$$(8.1.11) \quad \frac{\delta(\delta L)}{\delta \Lambda_j} = 0 \quad \forall j$$

Imporre la simmetria globale dunque equivale a

$$(8.1.12) \quad \partial_\mu \frac{\delta(\delta L)}{\delta(\partial_\mu \Lambda_j)} = 0 \quad \forall j$$

Definiamo ora il set di correnti

$$(8.1.13) \quad j_\mu^{(j)}(x) = \frac{\delta(\delta L)}{\delta(\partial_\mu \Lambda_j(x))}$$

(una per ogni parametro del gruppo). Tutte queste correnti, in virtu' della (12) sono conservate:

$$(8.1.14) \quad \partial^\mu j_\mu^{(j)}(x) = 0$$

e a ciascuna corrisponde una carica conservata:

$$(8.1.15) \quad Q^{(j)}(t) = \int d\mathbf{r} j_0^{(j)}(x) = \text{cost.}$$

8.2 MODELLI γ_5 E $\gamma_5 \gamma_\mu$

Applichiamo il teorema di Noether a una teoria mesonica standard. Assumiamo cioe' di studiare un sistema di nucleoni interagenti tramite scambio di mesoni π . La proprieta' di invarianza nota e' l'invarianza per rotazioni nello spazio dell'isospin. Si sa che il nucleone e' un doppietto di particelle (p ed n) e che i π formano un tripletto (π^+ , π^0 e π^-). Introduciamo dunque un bispinore in uno spazio apposito definito per l'occasione per descrivere il nucleone:

$$\psi = \begin{pmatrix} \psi_p \\ \psi_n \end{pmatrix}$$

(naturalmente ψ_p e ψ_n saranno a loro volta spinori di Dirac), mentre i π saranno descritti da 3 campi pseudoscalari:

Si definisce spesso, per comodita'

$$\phi^\pm = \frac{\phi_1 \pm i\phi_2}{\sqrt{2}}$$

Si definiscono poi le matrici di Pauli nello spazio dei bispinori precedentemente detti; convenzionalmente si indicano con τ . Si definiscono gli operatori a scaletta

$$\tau^\pm = \frac{\tau_1 \pm i\tau_2}{\sqrt{2}}$$

che trasformano il neutrone in protone e viceversa. Le lagrangiane libere sono

$$(8.2.1) \quad \mathcal{L}_0 = \bar{\psi}(i\not{\partial} - m)\psi + 1/2 (\partial_\mu \phi)^2 - \mu^2 \phi^2/2$$

L'interazione non e' ovviamente bloccata e viene usualmente costruita su basi fenomenologiche. Le scelte piu' usuali sono

$$(8.2.2) \quad \mathcal{L}_I^{PS} = -ig \bar{\psi} \gamma_5 \tau \phi \psi$$

$$(8.2.3) \quad \mathcal{L}_I^{PV} = -if \bar{\psi} \gamma_5 \gamma_\mu \tau \psi \partial^\mu \phi$$

Le due forme hanno ovviamente pregi e difetti, sui quali non e' il caso di discutere a lungo in questa sede, dato che e' coinvolta una grossa quantita' di analisi fenomenologiche. Basti osservare che

1. Le due teorie hanno lo stesso limite non relativistico nel senso che ambedue le interazioni elementari si riducono al vertice non relativistico

$$(8.2.4) \quad \mathcal{L}_I^{NR} = -i \frac{f_{\pi NN}}{m} \psi^\dagger (\underline{\tau} \cdot \sigma \cdot \nabla \underline{\phi}) \psi$$

ove gli spinori si intendono non piu' spinori di Dirac ma spinori a 2 dimensioni nello spazio dello spin.

2. La forma (2) e' rinormalizzabile mentre la (3) non lo e'.
3. La forma (2) viola la simmetria chirale, mentre la (3) in qualche modo la rispetta [1]. Come conseguenza la (2) riproduce malamente, sovrastimandola, la fotoproduzione di π in soglia [2].
4. In ogni caso entrambe le teorie sono invarianti per trasformazioni di isospin. Altrettanto naturalmente entrambe conservano la carica elettrica.

8.3 LA CORRENTE ELETTROMAGNETICA

Le due lagrangiane (8.2.2) e (8.2.3) come detto conservano entrambe la carica elettrica. Da un punto di vista formale osserviamo che entrambe sono invarianti rispetto alla trasformazione globale

$$(8.3.1) \quad \begin{aligned} \psi_r &\longrightarrow e^{-ie\Lambda} \psi_r \\ \psi_u &\longrightarrow \psi_u \\ \phi^\pm &\longrightarrow e^{\pm ie\Lambda} \phi^\pm \\ \phi_0 &\longrightarrow \phi_0 \end{aligned}$$

Si noti che qui non si parla di interazione elettromagnetica; ci si limita ad osservare che questa e' una proprieta' di invarianza globale della teoria e che quindi ad essa e' associata una corrente conservata. L'identificazione di tale corrente con la corrente elettromagnetica e' ancora di la' da venire.

Seguendo la falsariga del paragrafo 1 calcoliamo come varia L (o meglio la densita' di lagrangiana \mathcal{L}) sotto la trasformazione locale ottenuta richiedendo che $\Lambda \longrightarrow \Lambda(x)$.

Esaminiamo anzitutto \mathcal{L}_s . E' facile rendersi conto che

$$(8.3.2) \quad \delta \mathcal{L}_s = e \bar{\psi}_r \gamma_\mu \psi_r \partial^\mu \Lambda + e [\underline{\phi} \times \partial_\mu \underline{\phi}]_3 \partial^\mu \Lambda + e^2 [\phi_1^2 + \phi_2^2] (\partial_\mu \Lambda)^2$$

Ovviamente, siccome \mathcal{L}_I^{PS} non dipende dalle derivate, segue

$$(8.3.3) \quad \delta \mathcal{L}_I^{PS} = 0$$

mentre l'accoppiamento derivativo comporta

$$(8.3.4) \quad \delta \mathcal{L}_I^{PV} = i e f \partial^\mu \Lambda \bar{\psi} \gamma_\mu [\underline{\tau} \times \underline{\phi}]_3 \psi$$

La corrente associata a tale proprieta' di invarianza e' immediata a dedursi: per il caso pseudoscalare si ha

[1] M. Gell-Mann and M. Levy - Nuovo Cimento 16(1960)705.

[2] I. Blomqvist and J. M. Laget, Nucl. Phys. A280(1975)405.

$$(8.3.5) \quad j_{\mu}^{ps}(x) = e \bar{\psi} \gamma_{\mu} \psi + e [\underline{\psi} \times \partial_{\mu} \underline{\psi}]_3$$

e per il caso pseudovettoriale

$$(8.3.6) \quad j_{\mu}^{pv}(x) = j_{\mu}^{ps}(x) + i e f \bar{\psi} \gamma_5 \gamma_{\mu} [\underline{\psi} \times \underline{\psi}]_3 \psi$$

Diagrammaticamente

$$j_{\mu}^{ps} = \text{---} + \text{---}$$

$$j_{\mu}^{pv} = j_{\mu}^{ps} + \text{---}$$

8.4 MINIMAL COUPLING

Introduciamo l'interazione elettromagnetica in maniera "minimale" richiedendo quanto segue:

1. Aggiungiamo alla lagrangiana un campo elettromagnetico A_{μ} .
2. Richiediamo che l'invarianza globale precedentemente descritta diventi un'invarianza di gauge.
3. Richiediamo che per A la legge di trasformazione sia $A_{\mu} \rightarrow A_{\mu} - \partial_{\mu} \Lambda$ (ove naturalmente Λ e' lo stesso).

Allora e' immediato trovare che se, per esempio

$$(8.4.1) \quad \partial_{\mu} e^{-ie \Lambda(x)} \psi = e^{-ie \Lambda(x)} [\partial_{\mu} - ie \partial_{\mu} \Lambda(x)] \psi$$

si puo' definire un oggetto, detto **derivata covariante** che commuta con $\exp[-ie \Lambda(x)]$: basta porre infatti

$$(8.4.2) \quad D_{\mu} = \partial_{\mu} - ie A_{\mu}$$

e si trova immediatamente che

$$(8.4.3) \quad D_{\mu} e^{-ie \Lambda(x)} \psi = e^{-ie \Lambda(x)} D_{\mu} \psi$$

E' ovvio che se la particella ha carica opposta nella derivata covariante occorrera' cambiare segno. Piu' correttamente cioe' definiremo

$$(8.4.4) \quad D_{\mu} = \partial_{\mu} - i Q A_{\mu}$$

Q essendo l'operatore di carica. Avendo introdotto questa definizione e' chiaro che la nostra lagrangiana sara' invariante rispetto alla trasformazione locale pur di sostituire le derivate normali con le derivate covarianti, il che naturalmente implica l'introduzione di un accoppiamento tra il campo A_{μ} e i nucleoni ed i pioni della teoria. E' chiaro che dalla lagrangiana libera di un fermione si genera un accoppiamento lineare in A_{μ} , (perche' nella lagrangiana di Dirac c'e' solo una derivata prima) mentre la lagrangiana libera bosonica genera un termine lineare ed uno quadratico. Le lagrangiane di interazione possono contribuire esse pure all'interazione elettromagnetica solo se contengono accoppiamenti derivativi. In pratica la lagrangiana che otterremo sara'

$$(8.4.5) \quad \mathcal{L} = \mathcal{L}_0 + \mathcal{L}_{em} + \mathcal{L}_I + j_\mu(x) A^\mu(x) + B_{\mu\nu}(x) \tilde{A}^\mu(x) \tilde{A}^\nu(x)$$

ove \mathcal{L}_I sara' \mathcal{L}_I^{ps} o \mathcal{L}_I^{pv} secondo i casi, $j_\mu(x)$ e' la corrente definita dalle (8.3.6), (8.3.7) e $B_{\mu\nu}$ e' il termine proveniente dal termine quadratico nelle derivate della lagrangiana bosonica. Dall'espressione esplicita (8.3.3) si legge direttamente che il termine in questione e'

$$(8.4.6) \quad B_{\mu\nu} = e^2 \delta_{\mu\nu} \phi^+(x) \phi^-(x) = e^2 \delta_{\mu\nu} [\phi_1^2(x) + \phi_2^2(x)]$$

Diagrammaticamente questo termine corrisponde a



cioe' a un'interazione puntuale a due fotoni.

8.5 LE CORRENTI DI SCAMBIO. CASO PS.

La corrente elettromagnetica, come si e' visto, contiene termini di interazione tra nucleoni e γ cosi' come tra π e γ . In Fisica Nucleare si usa spesso, per motivi probabilmente di tradizione o di assuefazione, lavorare solo sui gradi di liberta' nucleonici. Le tecniche usate per eliminare i gradi di liberta' non desiderati (cioe' i pioni) sono essenzialmente copiate dalla teoria del potenziale ottico di Feshbach [3] ed elaborate da Gari e Hyuga [4] e da Arenhovel [5]. In pratica pero' il funzionale generatore fornisce un metodo assai piu' efficiente e meno complicato per generare lagrangiane efficaci eliminando i gradi di liberta' non desiderati.

Il funzionale generatore che descrive un sistema di nucleoni interagenti con bosoni e con un campo elettromagnetico sara'

$$(8.5.1) \quad Z[\bar{\eta}, \eta, \underline{J}, j_\mu^{ex}] = \frac{1}{\mathcal{N}} \int \mathcal{D}[\bar{\psi}, \psi, \underline{\phi}, A_\mu] \exp\{i \int dx [\mathcal{L}_{\pi N} + \mathcal{L}_{em} + j_\mu A^\mu + B_{\mu\nu} \tilde{A}^\mu \tilde{A}^\nu]\} \exp\{i \int dx [\bar{\psi} \eta + \bar{\eta} \psi + \underline{J} \underline{\phi} + j_\mu^{ex} A^\mu]\}$$

ove $\mathcal{L}_{\pi N}$ e' la lagrangiana del sistema πN interagente (per ora con interazione qualsiasi; poi nel seguito del paragrafo particolareggeremo l'interazione ad essere quella pseudoscalare), j_μ e $B_{\mu\nu}$ sono quelli definiti nel paragrafo precedente e j_μ^{ex} e' la sorgente classica del campo elettromagnetico.

Una osservazione, irrilevante per quanto ci concerne, ma tuttavia necessaria per dare significato agli oggetti scritti, e' che l'espressione (1) non e' ben definita, e perche' l'integrazione funzionale acquisti significato e' necessario introdurre un termine "gauge-fixing", problema

[3] H. Feshbach, Ann. Phys. 5(1958)357 e 19(1962)287.

[4] M. Gari e H. Hyuga, Z. Phys. A277(1976)291.

[5] H. Arenhovel, lezioni tenute all'Universita' di Genova, A. A. 1981/82.

questo connesso alla quantizzazione del campo elettromagnetico. Possiamo sempre immaginare tale termine (ad es. $\lambda (\partial_\mu A^\mu)^2$) contenuto in L_0 . A volte sarà omesso in seguito semplicemente per non appesantire la notazione. È chiaro che tale termine deve essere presente ogniqualvolta si richieda un significato ben preciso e non puramente formale per Z.

La possibilità di eliminare i gradi di libertà mesonici è ovvia se solo si pone attenzione al fatto che il campo mesonico compare in forma al più quadratica in tutto l'esponente dell'integrale funzionale, e che quindi può essere integrato esplicitamente.

Occorre ora specificare l'interazione, che assumiamo essere quella pseudoscalare. Poniamo

$$(8.5.2) \quad L^{(0)} = \bar{\psi} (i \not{\partial} - m) \psi + L_{e.m.} + e \bar{\psi}_r \gamma_\mu \psi_r A^\mu + \bar{\eta} \psi + \bar{\psi} \eta + j_\mu^{e^+} A^\mu$$

che è la parte di lagrangiana che non contiene il campo ϕ . Sia poi

$$(8.5.3) \quad L^{(1)} = -ig \bar{\psi} \gamma_5 \underline{\Sigma} \phi \psi + \underline{J} \phi = \underline{j} \phi + \underline{J} \phi$$

ove

$$(8.5.4) \quad \underline{j} [\bar{\psi}, \psi] = -ig \bar{\psi} \gamma_5 \underline{\Sigma} \psi$$

in modo da isolare il termine lineare nel campo ϕ , e infine

$$(8.5.5) \quad L^{(2)} = 1/2 (\partial_\mu \phi)^2 - \mu^2/2 \phi^2 + e [\phi \times \partial_\mu \phi]_3 A^\mu + e^2 [\phi_1^2 + \phi_2^2] A_\mu^2$$

che contiene la parte quadratica. Una separazione ulteriore si ha osservando che il campo ϕ_0 compare in modo diverso dagli altri (dato che non è accoppiato elettromagneticamente). Scriviamo cioè

$$(8.5.6) \quad \begin{aligned} L^{(1)} &= L_0^{(1)} + L_c^{(1)} \\ L_0^{(1)} &= j_0 \phi_0 + J_0 \phi_0 \\ L_c^{(1)} &= j_1 \phi_1 + J_1 \phi_1 + j_2 \phi_2 + J_2 \phi_2 \end{aligned}$$

$$(8.5.7) \quad \begin{aligned} L^{(2)} &= L_0^{(2)} + L_c^{(2)} \\ L_0^{(2)} &= 1/2 (\partial_\mu \phi_0)^2 - \mu^2/2 \phi_0^2 \\ L_c^{(2)} &= 1/2 (\partial_\mu \phi_1)^2 + 1/2 (\partial_\mu \phi_2)^2 \\ &\quad - (\mu^2/2 - e^2 A_\mu^2) (\phi_1^2 + \phi_2^2) + e [\phi \times \partial_\mu \phi]_3 A^\mu \end{aligned}$$

L'integrale su ϕ_0 ora è immediato: infatti resta solo

$$\begin{aligned} \int \mathcal{D}[\phi_0] \exp\{i \int dx [1/2 (\partial_\mu \phi_0)^2 - \mu^2/2 \phi_0^2 + (j_0 + J_0) \phi_0]\} &= \\ = \exp\{-i/2 \int dx dy [j_0(x) + J_0(x)] D_0(x-y) [j_0(y) + J_0(y)]\} &= \\ = \exp\{-i/2 \int J_0 D_0 J_0\} \exp\{-i \int j_0 D_0 J_0\} \exp\{-i/2 \int j_0 D_0 j_0\} & \end{aligned}$$

Il primo fattore ($\exp\{-i/2 \int J_0 D_0 J_0\}$) altro non descrive che la propagazione libera dei π , non contiene altri campi (cioè altre variabili di integrazione) e può quindi essere estratto dall'integrale funzionale. È però del tutto irrilevante in quanto descrive un campo libero che non interagisce col resto del sistema. Gli altri due termini invece contengono i campi ψ attraverso j_0 . Gli esponenti si possono interpretare come lagrangiane efficaci che descrivono i processi elementari



ove la linea tratteggiata interna denota D_0 , che svolge il ruolo di interazione efficace, non locale e dipendente dall'energia. Si ottiene allora

$$(8.5.8) \quad Z[\bar{\eta}, \eta, \underline{J}, j_\mu^{ex}] = \exp\{-i/2 \int J_0 D_0 J_0\} \\ \int \mathcal{D}[\bar{\psi}, \psi, A_\mu] \exp\{i \int dx \mathcal{L}_0 + \int j_0 D_0 J_0 + 1/2 \int j_0 D_0 j_0\} \\ \int \mathcal{D}[\phi_1, \phi_2] \exp\{i \int dx [1/2 (\partial_\mu \phi_1)^2 + 1/2 (\partial_\mu \phi_2)^2 - (\mu^2/2 - e^2 A_\mu^2) (\phi_1^2 + \phi_2^2) + \\ + e [\underline{\psi} \times \partial_\mu \underline{\psi}]_3 A^\mu + (j_1 + J_1) \phi_1 + (j_2 + J_2) \phi_2]\}$$

Si tratta di calcolare esplicitamente ora l'integrale su ϕ_1 e ϕ_2 . Esaminiamo anzitutto l'esponente. Con qualche integrazione per parti la parte quadratica si puo' riscrivere come

$$\int dx \phi^\dagger(x) \{-\square - (\mu^2 - 2e^2 A_\mu^2) + 2ieA_\mu \partial^\mu\} \phi^-(x) = \\ = \int dx dy \phi^\dagger(x) D_A^{-1}(x,y) \phi^-(y)$$

ove si e' definito

$$(8.5.9) \quad D_A^{-1}(x,y) = [-\square_x - (\mu^2 - 2e^2 A_\mu^2) - 2ieA_\mu \partial_x^\mu] \delta(x-y)$$

mentre la parte lineare si riscrive come

$$\int dx \{ [j^+ + J^+] \phi^- + [j^- + J^-] \phi^+ \}$$

L'integrale sui campi pionici resta il seguente:

$$(8.5.10) \quad \int \mathcal{D}[\phi^+, \phi^-] \exp\{i \int dx \int dy \phi^\dagger(x) D_A^{-1}(x,y) \phi^-(y)\} \\ \exp\{i \int dx [(j^+(x) + J^+(x)) \phi^-(x) + (j^-(x) + J^-(x)) \phi^+(x)]\} \\ = \exp\{-i \int dx dy [j^+(x) + J^+(x)] D_A(x,y) [j^-(y) + J^-(y)]\} [\det D_A^{-1}]^{-1}$$

Otteniamo allora per Z l'espressione

$$(8.5.11) \quad Z[\bar{\eta}, \eta, \underline{J}, j_\mu^{ex}] = \frac{1}{\mathcal{N}} \exp\{-i/2 \int J_0 D_0 J_0\} \\ \int \mathcal{D}[\bar{\psi}, \psi, A_\mu] \exp\{i \int dx [\bar{\psi} (i \not{\partial} - m) \psi - 1/4 F_{\mu\nu} F^{\mu\nu} + \\ + e \bar{\psi}_r \gamma_\mu \psi_r A^\mu + \bar{\psi} \eta + \bar{\eta} \psi + A^\mu j_\mu^{ex}]\} \\ \exp\{-i \int j_0 D_0 J_0\} \exp\{-i/2 \int j_0 D_0 j_0\} \\ [\det D_A^{-1}]^{-1} \exp\{-i \int dx [j^+(x) + J^+(x)] D_A(x,y) [j^-(y) + J^-(y)]\}$$

Ben nota e'

$$\exp\{-\text{Tr} \ln D_0\} \exp\{-\text{tr} \ln D_A^{-1}\} = \exp\{-\text{Tr} \ln D_0 D_A^{-1}\}$$

L'aver moltiplicato per una costante e' ovviamente del tutto irri-
perche' si limita ad alterare la costante di normalizzazione
naturalmente non influisce sulla fisica descritta da Z. Osserviamo

$$(8.5.12) \quad [D_0 D_A^{-1}](x,y) = \\ = \delta(x-y) + 2e^2 D_0(x-y) A_\mu^2 + 2ie A_\mu \partial_x^\mu D_0(x-y) \\ = \delta(x-y) - \text{F[A]} D_0(x-y)$$

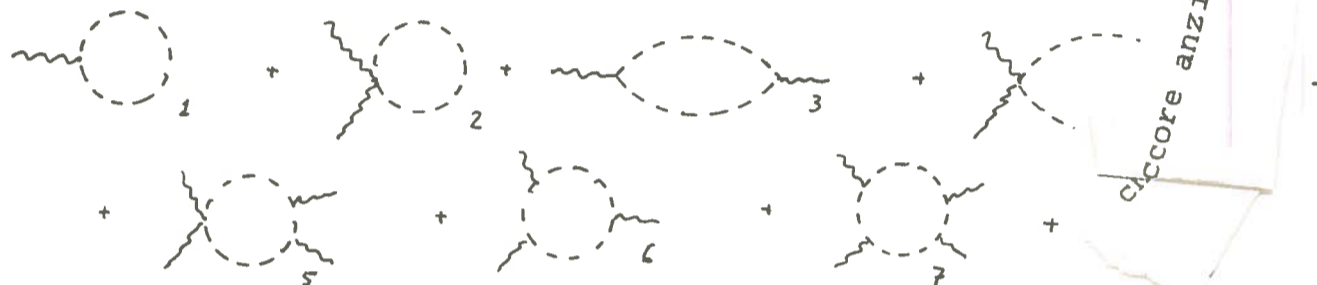
ove

$$- \text{F[A]} = 2e A_\mu^2(x) + 2ie A_\mu \partial_x^\mu$$

L'esponenziale in sostanza diventa

$$(8.5.13) \quad \exp\{-\text{Tr} \ln D_0 D_A^{-1}\} = \exp\{-\text{Tr} \ln(1-FD_0)\} = \exp\{\text{Tr} \sum_n (F^n D_0^n)\}$$

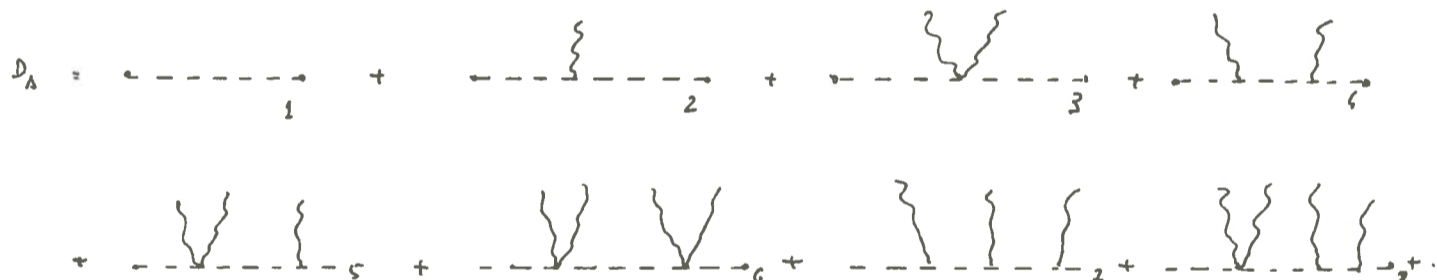
Diagrammaticamente F denota un vertice a 1 o 2 fotoni
propagazione di un π libero; la traccia significa integrare su
ultima variabile. In altre parole il determinante contiene tut-
bosonici del tipo



mentre D_A segue da $D_0 D_A^{-1} = 1 - FD_0$, cioè $D_A = D_0 + D_0 F D_A$ che e' una tipica
equazione di Dyson [6]. Di qui segue

$$(8.5.14) \quad D_A = \frac{D_0}{1 - F D_0} = D_0 + D_0 F D_0 + \dots$$

e diagrammaticamente



Per semplificare le espressioni poniamo $\underline{J} = 0$ (perche' non e' coerente
avere scelto di lavorare nel solo spazio di Hilbert dei nucleoni e poi

[6] Si noti che il segno di F nella definizione (12) e' stato proprio
scelto in modo da riprodurre l'equazione di Dyson.

$$\exp\{iS_{eff}\} \exp\{i \int dx [\bar{\psi} \psi + \bar{\psi} \gamma_\mu \psi A^\mu]\}$$

ove l'azione efficace ha la forma

$$(8.5.16) \quad S_{eff} = \int dx \{ \mathcal{L}_N + \mathcal{L}_{em} + e \bar{\psi} \gamma_\mu \psi A^\mu \} + \int dx dy \{ j^+(x) D_A(x-y) j^-(y) + j^0(x) D_0(x-y) j^0(y)/2 \} + \sum_n (F D_0)^n / n$$

La semplificazione decisiva si ottiene limitandoci a considerare i termini del secondo ordine nell'accoppiamento elettromagnetico. Allora osserviamo che la serie di D_A si riduce ai termini 1,2,3,4, cioè'

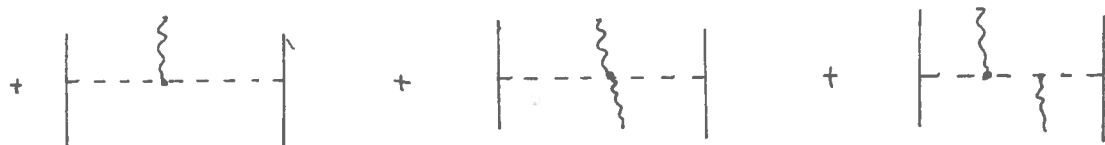
$$(8.5.17) \quad D_A(x,y) \cong D_0(x-y) + 2ie \int dz D_0(x-z) \gamma_\mu^A D_0(z-y) A_\mu(z) + 2e^2 \int dz A_\mu^2(z) D_0(x-z) D_0(z-y) - 4e^2 \int dz dw A_\mu(z) A_\nu(w) D_0(x-z) \gamma_\mu^A D_0(z-w) \gamma_\nu^A D_0(w-y)$$

Della serie $\exp\{-Tr \ln D_A\}$ restano invece solo i termini 1,2,3. Ma il primo e' chiaramente nullo, il secondo e' una costante che rinormalizza la massa del γ e come tale e' irrilevante, mentre il terzo puo' dar luogo tutt'al piu' a un fattore di forma. Puo' creare problemi nelle regioni ad alte energie, laddove il fotone ha componenti adroniche significative, e va rilevato che in pratica i due pioni hanno uno stato risonante che e' la ρ , quindi un tale diagramma ci dice in qualche modo che il γ puo' trasformarsi in ρ e che e' poi la ρ che interagisce con il nucleo (vector dominance); e' tuttavia irrilevante nel range di energie tipico della Fisica Nucleare. Percio' si puo' porre

$$(8.5.18) \quad \exp\{Tr \ln D_A\} = 1$$

L'azione efficace risultera' allora descritta da

$$(8.5.19) \quad S_{eff} = \int dx \{ \mathcal{L}_N + \mathcal{L}_{em} + e \bar{\psi} \gamma_\mu \psi A^\mu \} + \int dx dy \underline{j}(x) D_0(x-y) \underline{j}(y)/2 +$$



8.6 CORRENTI DI SCAMBIO. MODELLO PV.

Nel modello pseudovettoriale spezziamo di nuovo la lagrangiana in 3 parti, $\mathcal{L} = \mathcal{L}^{(0)} + \mathcal{L}^{(1)} + \mathcal{L}^{(2)}$ ma questa volta $\mathcal{L}^{(1)}$ ha un pezzo aggiuntivo:

$$(8.6.1) \quad \mathcal{L}^{(1)} = if \bar{\psi} \gamma_5 \gamma_\mu \psi \partial^\mu \phi +ief A^\mu \bar{\psi} \gamma_5 \gamma_\mu [\underline{\tau} \times \underline{\phi}]_3 \psi + \underline{j} \cdot \underline{\phi}$$

Anche qui separiamo i π_0 :

$$(8.6.2) \quad \mathcal{L}_0^{(1)} = (j_0 + J_0) \phi_0$$

$$(8.6.3) \quad \mathcal{L}_c^{(1)} = (j^+ + J^+) \phi^- + (j^- + J^-) \phi^+ + ef A^\mu \bar{\psi} \gamma_5 \gamma_\mu \tau^- \psi \phi^+ - e f A^\mu \bar{\psi} \gamma_5 \gamma_\mu \tau^+ \psi \phi^-$$

ove

$$(8.6.4) \quad \underline{j} = -i f \partial^\mu (\bar{\psi} \gamma_\mu \psi)$$

Definiamo, per abbreviare le notazioni,

$$(8.6.5) \quad \tilde{J}^\pm = j^\pm + J^\pm \mp e f A^\mu \bar{\psi} \gamma_\mu \psi$$

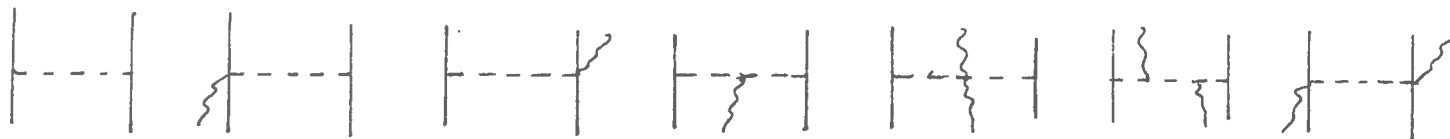
e l'integrazione dei campi bosonici e' di nuovo immediata:

$$(8.6.6) \quad Z[\bar{\eta}, \eta, \underline{J}, j_\mu^{er}] = \exp\{-i/2 [J_0 D_0 J_0] \} \int \mathcal{D}[\bar{\psi}, \psi, A_\mu] \\ \exp\{i \int dx [\bar{\psi} (i \not{\partial} - m) \psi - 1/4 F_{\mu\nu} F^{\mu\nu} + e \bar{\psi} \gamma_\mu \psi A^\mu \\ + \bar{\eta} \psi + \bar{\psi} \eta + j_\mu^{er} A^\mu] \} \exp\{-i \int j_0 D_0 J_0 \} \\ \exp\{-i/2 \int dx dy j_0(x) D_0(x-y) j_0(y) \} [\det D_A^{-1}]^{-1} \\ \exp\{-i \int dx dy \tilde{J}^+(x) D_A(x,y) \tilde{J}^-(y) \}$$

Di nuovo all'ordine e^2 si ha $\det D_A = 1$; questa volta invece nello sviluppo di D_A c'e' da considerare un termine in piu': ponendo a 0 i \underline{J} per semplificare le formule si ha

$$(8.6.7) \quad \int dx dy \tilde{J}^+(x) D_A(x,y) \tilde{J}^-(y) \approx \\ \approx \int j^+ D_0 j^- - \int e f A^\mu \bar{\psi} \gamma_\mu \psi D_0 j^- + \int j^+ D_0 e f A^\mu \bar{\psi} \gamma_\mu \psi \\ + \int j^+ D_0 2ie A_\mu \partial^\mu D_0 j^- + \int j^+ D_0 2e^2 A_\mu^2 D_0 j^- \\ + \int j^+ D_0 2ie A_\mu \partial^\mu D_0 2ie A_\nu \partial^\nu D_0 j^- \\ + \int i e f A^\mu \bar{\psi} \gamma_\mu \psi D_0 i e f A^\nu \bar{\psi} \gamma_\nu \psi = S_1$$

che corrisponde ai grafici



Naturalmente l'azione efficace che cerchiamo sara' proprio descritta da questi vertici elementari:

$$(8.6.8) \quad S_{eff} = \int dx [\mathcal{L}_N + \mathcal{L}_{e.m.} + e \bar{\psi} \gamma_\mu \psi A^\mu] + S_1$$



CAPITOLO 9

TEORIE DI GAUGE

9.1 INTRODUZIONE

Seguiremo come esempio una versione addomesticata del modello a quarks ed applicheremo le teorie di gauge alla QED e alla QCD. La discussione avverrà naturalmente ad un livello dapprima classico - intendendo con ciò che applicheremo il concetto di invarianza di gauge ad oggetti che sono trattati come campi classici - , per poi passare alla quantizzazione tramite il metodo dell'integrazione funzionale.

L'idea di base della teoria consiste nel ricercare una lagrangiana per i campi che sia la più semplice generalizzazione di una lagrangiana libera, e che possieda però un'invarianza rispetto a trasformazioni locali di un qualche particolare, ma ben definito, gruppo di Lie, dove per "trasformazioni locali" si può intendere, ad esempio, trasformazioni realizzate tramite elementi di un gruppo di Lie i cui parametri sono funzioni (regolari) dallo spazio-tempo ad un sottoinsieme dei numeri reali.

Il modo di procedere per la costruzione di queste Lagrangiane localmente invarianti consiste nel considerare una lagrangiana per un insieme di fermioni liberi, individuarne il gruppo di simmetria globale e compiere poi gli opportuni passi per rendere quest'ultima locale.

9.2 QED CLASSICA

Il campo fermionico ψ di cui prendiamo ora la lagrangiana libera è quello dell'elettrone.

La densità di tale lagrangiana è, come ben noto

$$(9.2.1) \quad \mathcal{L}(x) = \bar{\psi}(x) (i\not{x} - m) \psi(x)$$

Essa origina, per l'elettrone libero, l'equazione di Dirac:

$$(9.2.2) \quad (i\not{x} - m) \psi(x) = 0$$

La densità di lagrangiana è, a vista, invariante rispetto ad una trasformazione globale della fase del campo ψ . Vale a dire che se noi trasformiamo il campo ψ secondo la legge

$$(9.2.3) \quad \psi \rightarrow e^{i\lambda} \psi$$

con λ numero reale fissato, allora \mathcal{L} rimane invariata.

Questa possibilità di trasformare il campo ψ senza che si modifichi la densità di lagrangiana responsabile dell'equazione del moto per ψ si esprime formalmente dicendo che la densità di lagrangiana di un campo elettronico libero è invariante rispetto ad una trasformazione (globale) elemento del gruppo $U(1)$.

Se però noi avessimo trasformato il campo ψ moltiplicandolo per una fase che non fosse sempre la stessa in ciascun punto dello spazio-tempo, allora non avremmo avuto l'invarianza della densità di lagrangiana per il campo elettronico libero.

Indichiamo con M lo spazio-tempo inteso come varietà differenziabile. Il gruppo delle trasformazioni che mutano, punto per punto in maniera

diversa, la fase di un campo puo' essere pensato come l'insieme delle funzioni (sufficientemente regolari da non creare problemi)

$$(9.2.4) \quad g : M \rightarrow U(1) \quad ; \quad x \rightarrow g(x) = \exp\{i\lambda(x)\}$$

(λ e' una funzione $\lambda : M \rightarrow [0, 2\pi]$, che possiamo pensare come parametro di $U(1)$ dipendente dal posto). In questo gruppo il prodotto, l'elemento inverso, etc. sono definito punto per punto su M . Ad esempio se g_1 e' l'applicazione

$$g_1 : x \rightarrow \exp\{i\lambda_1(x)\}$$

mentre g_2 e' l'applicazione:

$$g_2 : x \rightarrow \exp\{i\lambda_2(x)\}$$

allora il prodotto $g_1 \cdot g_2$ sara' l'applicazione:

$$g_1 g_2 : x \rightarrow \exp\{i\lambda_1(x) + i\lambda_2(x)\}$$

Indicheremo con \mathcal{G} questo gruppo di trasformazioni e lo chiameremo **gruppo di gauge**

Puo' essere comodo pensare al gruppo di gauge come ad un oggetto costituito da tante copie del gruppo $U(1)$, ciascuna associata indipendentemente ad un punto dello spazio-tempo e dove l'unico vincolo fra queste copie e' la regolarita' delle funzioni usate per la parametrizzazione.

L'azione di $g : x \rightarrow \exp\{i\lambda(x)\}$, elemento di \mathcal{G} , sul campo ψ e' tale che:

$$(9.2.5) \quad \psi(x) \rightarrow e^{i\lambda(x)} \psi(x) \quad \forall x \in M$$

Vediamo subito che la densita' di lagrangiana \mathcal{L} non resta invariata: infatti il termine $i\bar{\psi}(x) \not\partial \psi(x)$ muta a causa della derivata che ovviamente non si puo' essere far commutare col fattore $\exp\{i\lambda(x)\}$.

Cerchiamo allora una nuova densita' di lagrangiana che sia invariante: modifichiamo cioe' l'operatore di derivazione in maniera opportuna, ed obblighiamolo a trasformarsi anch'esso sotto l'azione del gruppo di gauge \mathcal{G} .

A tale scopo definiamo l'operatore \not{D} , detto **derivata covariante**,

$$(9.2.6) \quad \not{D} =: \not{\partial} + ie \gamma_\mu A^\mu(x)$$

costruito tramite l'ausilio di un opportuno campo A^μ (che e' un campo vettoriale rispetto alle trasformazioni del gruppo di Lorentz), il quale si trasforma, sotto l'azione di G , secondo la legge:

$$(9.2.7) \quad A^\mu(x) \rightarrow A^\mu(x) + \frac{1}{e_0} \partial^\mu \lambda(x)$$

(e_0 essendo un numero reale positivo al quale si potra' dare in seguito il significato fisico di costante d'accoppiamento)

La verifica che la densita' di lagrangiana:

$$(9.2.8) \quad \mathcal{L}_c = \bar{\psi}(x) (i \not{D} - m) \psi(x)$$

e' veramente invariante rispetto alle trasformazioni di G e' un calcolo diretto:

$$\bar{\psi}(x) [\not{\partial} \psi(x) + ie_0 \not{A}_0(x) \psi(x)]$$

va, sotto l'azione di g , in

$$\begin{aligned} e^{i\lambda(x)} \bar{\psi}(x) [\not{\partial} (e^{-i\lambda(x)} \psi(x)) + ie_0 \not{A}(x) \psi(x) + i \not{\lambda}(x) \psi(x)] \\ = \bar{\psi}(x) [\not{\partial} \psi(x) + ie_0 \not{A}(x) \psi(x)] \end{aligned}$$

cioe' resta immutato.

Vediamo cosi' che abbiamo potuto costruire una lagrangiana invariante per una trasformazione di fase locale dei campi, a patto di introdurre un campo A^μ il quale si comporti in maniera opportuna rispetto alle trasformazioni in questione. Questo nuovo campo fornisce, nella densita' di lagrangiana invariante \mathcal{L}_c , un termine di interazione tra i fermioni. Se noi interpretiamo A^μ come campo elettromagnetico, allora cio' che abbiamo costruito adesso, partendo dalla lagrangiana libera per i fermioni e richiedendo l'invarianza per una trasformazione di fase locale, altro non e' che la lagrangiana elettromagnetica per la descrizione degli elettroni interagenti. In altre parole possiamo asserire che l'interazione nasce da una richiesta di invarianza locale.

Ad essere precisi alla lagrangiana \mathcal{L}_c manca ancora il termine cinetico per il campo elettromagnetico; ad esso provvediamo subito.

Questo termine deve essere anch'esso invariante di gauge, ed inoltre deve essere un scalare per quanto concerne il suo comportamento rispetto alle trasformazioni di Lorentz. A causa della legge di trasformazione (7) non e' possibile inserire nel termine cinetico dei prodotti contenenti A^μ poiche' questi romperebbero la simmetria di gauge. Il primo oggetto a carattere tensoriale rispetto alle trasformazioni del gruppo di Lorentz, che sia invariante rispetto a trasformazioni di G e' il tensore antisimmetrico

$$(9.2.9) \quad F_{\mu\nu}(x) =: \partial_\mu A_\nu(x) - \partial_\nu A_\mu(x)$$

Tramite $F_{\mu\nu}$ si costruisce lo scalare di Lorentz $F_{\mu\nu}(x) F^{\mu\nu}(x)$, il quale, moltiplicato convenzionalmente per $-1/4$, costituisce il termine cinetico per il campo elettromagnetico.

9.3 QCD CLASSICA

E' noto che per spiegare in modo soddisfacente la dinamica dei quarks e' necessario introdurre un nuovo numero quantico, detto **colore**, in modo tale che i quarks possano essere simmetrizzati rispetto a spin e flavour. In questo modo ad esempio le particelle del decupletto possono essere ottenute come transizioni di spin-flip dall'ottetto ed altri ottetti e decupletti ad energie piu' elevate si reinterpretano come transizioni orbitali [1]. Naturalmente moltissime analisi fenomenologiche confortano questa conclusione.

Poiche' ogni quark puo' apparire in tre stati di colore, e' chiaro che questo numero quantico e' associato a rappresentazioni del gruppo $U(3)$. In altre parole: sia il campo che descrive un certo quark di flavour f ($f=u,d,s,c,b,t,\dots$?); allora

[1] F. E. Close, "An Introduction to Quarks and Partons", Academic Press, Londra (1979).

$$(9.3.1) \quad \psi_j = \begin{pmatrix} \psi_j^r \\ \psi_j^v \\ \psi_j^b \end{pmatrix}$$

r,v,b indicano le tre componenti del campo dei diversi colori (rosso, verde, blu). Per esempio

$$\psi_j = \begin{pmatrix} \psi_j^r \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

rappresenterebbe un quark rosso. (Si sottolinea che ogni componente (j=r,v,b) e' uno spinore di Dirac)

Un quark libero avrebbe equazione del moto :

$$(9.3.2) \quad (i\not{x} - m) \psi(x) = 0 \quad j=r,v,b$$

deducibili dalla densita' di lagrangiana:

$$(9.3.3) \quad \mathcal{L}(x) = \sum_f \bar{\psi}(x) (i\not{x} - m) \psi(x)$$

Questa densita' di lagrangiana risulta invariante rispetto a trasformazioni di U(3), ed e' immediato verificarlo poiche' U(3) e' definito come quel gruppo di trasformazioni che lasciano invariata la forma sesquilineare $\sum_{i=1}^3 z_i^* z_i$.

Naturalmente il gruppo U(3) contiene un sottogruppo invariante abeliano U(1), corrispondente alla conservazione del numero barionico, che e' del tutto indipendente dall'altro sottogruppo SU(3). Sara' solo di quest'ultimo che ci occuperemo (se trasformassimo anche U(1) in gruppo di gauge ci troveremmo con un duplicato della QED di cui non c'e' alcuna evidenza).

Come nel caso dell'elettrone libero questo gruppo e' un gruppo di trasformazioni globali; adesso noi lo renderemo locale modificando la densita' di lagrangiana come gia' abbiamo fatto nel caso precedente. L'unica sostanziale differenza risiede nel fatto che il gruppo SU(3) non e' abeliano. Cio' comportera' che i campi, analoghi al potenziale elettromagnetico A^μ, che noi introdurremo, oltre a mediare l'interazione fra i quarks, avranno anche un'interazione tra di loro.

Per ragioni di generalita' noi, invece di usare esplicitamente SU(3) come gruppo di gauge, faremo riferimento ad un generico gruppo di Lie compatto G (questo gruppo G deve essere compatto per svariati motivi: ad esempio si vuole che conservi una forma definita positiva - l'energia cinetica - oppure che sia possibile avere ogni suo elemento come esponenziazione di un elemento dell'algebra di Lie del gruppo, ecc. In linea di principio non e' necessario che G sia semplice [2] pero' noi lo

 [2] Gruppo di Lie semplice: non contiene sottogruppi di Lie invarianti (e non e' un gruppo abeliano)
 Gruppo di Lie semisemplice: e' composto da sottogruppi semplici; vale a dire che ci sono sottogruppi invarianti ma non sono abeliani.
 Gruppo non semisemplice: contiene sottogruppi invarianti di Lie abeliani.
 Ad esempio U(3) non e' semisemplice perche' contiene un sottogruppo invariante U(1): U(3)=SU(3)XU(1).

assumiamo tale per semplicità'. Invero se G non è semplice si può trattare separatamente ogni suo sottogruppo invariante, associando ad ognuno una propria "costante d'accoppiamento".)

Allora, allo scopo di riepilogare:
 G è un gruppo di Lie (semplice) compatto;
Con \mathfrak{G} indichiamo la sua algebra di Lie, che supponiamo abbia m generatori.
Con T_r ($r=1,2,\dots,m$) indichiamo tali generatori.

Allora un elemento $T \in \mathfrak{G}$ si scrive

$$(9.3.4) \quad T = \lambda_r T_r$$

(Indici ripetuti si intendono sommati). Poiché il gruppo G è compatto, ogni $\gamma \in G$ (connesso all'identità) si scrive:

$$(9.3.5) \quad \gamma = \exp\{\lambda_r T_r\}$$

Ora facciamo diventare G un gruppo di gauge, procedendo come nel caso dell'elettromagnetismo: prendiamo una copia di G in ogni punto $x \in M$, indichiamola con G_x e formiamo il gruppo

$$(9.3.6) \quad \mathcal{G} \approx \int G_x$$

Volendo possiamo pensare gli elementi di \mathcal{G} come applicazioni da M a G e scrivere:

$$(9.3.7) \quad g(x) = \exp\{\lambda_r(x) T_r\}$$

(in analogia con $g(x) = \exp\{i\lambda(x)\}$ dell'elettromagnetismo), associando così, tramite i generatori T_r , un set di funzioni differenziabili $\lambda_r: M \rightarrow \mathbb{R}$ ad un elemento del gruppo di gauge [3].

D'ora in poi, con la lettera g indicheremo indistintamente:
i) un elemento del gruppo di gauge \mathcal{G} .
ii) il set di funzioni $\lambda_r: M \rightarrow \mathbb{R}$ ad esso associato.
iii) la trasformazione che tale elemento induce sui campi, sulle derivate, sui tensori ecc.

Torniamo ai quarks, e non riscriviamo più ogni volta l'indice di flavour f in quanto non è essenziale.

$g \in \mathcal{G}$ è una trasformazione di carattere locale che muta i campi:

$$(9.3.8) \quad [g(\psi)](x) = U_{g(x)} \psi(x)$$

dove $U: G \rightarrow \text{Aut } V$ è una rappresentazione (non banale) del gruppo di Lie G , avente come carrier space lo spazio vettoriale V in cui assume valori il campo ψ . Se, ad esempio, G è $SU(3)$ e V è il tripletto

$$\begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \psi_3 \end{pmatrix}$$

[3] Si noti che, poiché ogni elemento del gruppo di gauge \mathcal{G} è in corrispondenza con una funzione, cioè equivale a dire che lo spazio dei parametri ha infinite dimensioni. Questo fatto ci dice (in virtù di un teorema dovuto a Gleason) che il gruppo di gauge non è localmente compatto.

allora U sarà una rappresentazione fondamentale; scegliamo quella più semplice, V sarà \mathbb{C}^3 e

$$(9.3.9) \quad [g(\psi)](x) = g(x) \psi(x)$$

(allo scopo di non caricare di indici le formule che scriveremo, useremo nel seguito quest'ultima espressione invece della (8)).

Dobbiamo cercare la derivata covariante D_μ . Per l'invarianza deve essere

$$(9.3.10) \quad g[D_\mu \psi](x) = g(x) (D_\mu \psi)(x)$$

vale a dire che la derivata di un campo deve trasformarsi come un campo. Poiché un campo si trasforma rimanendo "moltiplicato" per $g(x)$, allora la (10) è valida se è soddisfatta la proprietà di trasformazione:

$$(9.3.11) \quad g(D_\mu [\])(x) = g(x) D_\mu g^{-1}(x) [\]$$

Scriviamo D_μ come:

$$(9.3.12) \quad D_\mu = \partial_\mu + e_0 A_\mu(x)$$

con A_μ elemento di \mathfrak{G} (in altre parole A_μ è un campo a valori nell'algebra di Lie del gruppo di Lie G).

Cerchiamo di vedere quale deve essere la legge di trasformazione di affinché sia soddisfatta la (11). Si ha :

$$\begin{aligned} g(D_\mu [\])(x) &= \partial_\mu [\] + e_0 [g(A_\mu)](x) [\] = g(x) \{ \partial_\mu [\] + e_0 A_\mu(x) \} g^{-1}(x) \\ &= g(x) \partial_\mu g^{-1}(x) [\] + \partial_\mu [\] + g(x) e_0 A_\mu(x) g^{-1}(x) \end{aligned}$$

Da cui

$$(9.3.13) \quad g(A_\mu)(x) = g(x) A_\mu(x) g^{-1}(x) + \frac{1}{e_0} g(x) \partial_\mu g^{-1}(x)$$

Cerchiamo infine il termine di energia cinetica. Occorre una quantità con buone proprietà di trasformazione rispetto al gruppo di gauge, e così va bene, formalmente [4]

$$(4.3.14) \quad F_{\mu\nu} =: [D_\mu, D_\nu]$$

ossia, più esplicitamente

$$(4.3.15) \quad \frac{1}{e_0} F_{\mu\nu}(x) = \partial_\mu A_\nu(x) - \partial_\nu A_\mu(x) + e_0 [A_\mu(x), A_\nu(x)]$$

La proprietà di trasformazione

$$(4.3.16) \quad g(F_{\mu\nu})(x) = g(x) F_{\mu\nu}(x) g^{-1}(x)$$

è verificabile direttamente dalla forma (14).

Anche qui per la lagrangiana dobbiamo cercare quegli invarianti rispetto al gruppo \mathbb{C} che sono anche scalari rispetto al gruppo di Lorentz.

[4] Si intende $\partial_\mu \partial_\nu - \partial_\nu \partial_\mu = 0$. Osserviamo che anche nel caso elettromagnetico è $F_{\mu\nu} = [D_\mu, D_\nu] = (\partial_\mu + ieA_\mu)(\partial_\nu + ieA_\nu) - (\partial_\nu + ieA_\nu)(\partial_\mu + ieA_\mu) = e(\partial_\mu A_\nu - \partial_\nu A_\mu)$, e questo perché $[A_\mu, A_\nu] = 0$.

I piu' semplici (tali cioe' da introdurre al piu' derivate seconde) sono due:

$$(9.3.17) \quad \begin{aligned} & \text{Tr}\{F_{\mu\nu}(x) F^{\mu\nu}(x)\} \\ & \text{Tr}\{\epsilon_{\mu\nu\rho\sigma} F^{\mu\nu}(x) F^{\rho\sigma}(x)\} \end{aligned}$$

dove la traccia si intende fatta relativamente alle matrici nelle quali prendono valore i campi. Il secondo invariante e' una divergenza, come puo' essere mostrato con un noioso calcolo, e pertanto rimane soltanto il primo quale valido candidato per la nostra lagrangiana. Scriviamo [5]:

$$(9.3.18) \quad \mathcal{L}_{YM} = -\frac{1}{2e_0^2} \text{Tr}\{F_{\mu\nu}(x) F^{\mu\nu}(x)\}$$

Sviluppando per esteso tale espressione si ha

$$\begin{aligned} \mathcal{L}_{YM}(x) &= \frac{1}{2e_0^2} \text{Tr}\{e_0^2 A_{\nu,\mu} A^{\mu,\nu} - e_0^2 A_{\nu,\mu} A^{\nu,\mu} + e_0^3 A_{\nu,\mu} A^{\mu} A^{\nu} - e_0^3 A_{\nu,\mu} A^{\nu} A^{\mu} \\ &- e_0^2 A_{\mu,\nu} A^{\mu,\nu} + e_0^2 A_{\mu,\nu} A^{\nu,\mu} - e_0^3 A_{\mu,\nu} A^{\mu} A^{\nu} + e_0^3 A_{\mu,\nu} A^{\nu} A^{\mu} + e_0^3 A_{\mu} A_{\nu} A^{\nu,\mu} \\ &- e_0^3 A_{\mu} A_{\nu} A^{\mu,\nu} + e_0^4 A_{\mu} A_{\nu} A^{\mu} A^{\nu} - e_0^4 A_{\mu} A_{\nu} A^{\nu} A^{\mu} - e_0^3 A_{\nu} A_{\mu} A^{\nu,\mu} \\ &+ e_0^3 A_{\nu} A_{\mu} A^{\mu,\nu} - e_0^4 A_{\nu} A_{\mu} A^{\mu} A^{\nu} - e_0^4 A_{\nu} A_{\mu} A^{\nu} A^{\mu}\} \\ &= (A_{\nu,\mu})_r (A^{\mu,\nu})_r - (A_{\nu,\mu})^r (A^{\nu,\mu})_r + \\ &+ 2e_0 C_{rst} (A_{\mu})_r (A_{\nu})_s (A^{\nu,\mu})_t - \frac{e_0^2}{2} C_{rst} C_{pqk} (A_{\mu})_s (A_{\nu})_t (A^{\mu})_r (A^{\nu})_q \end{aligned}$$

dove le quantita' C_{rst} sono le costanti di struttura dell'algebra \mathfrak{g} , definite dai commutatori

$$(9.3.19) \quad [T_r, T_s] = C_{rst} T_t$$

in maniera che [6]

$$\begin{aligned} [A_{\mu}, A_{\nu}] &= [(A_{\mu})_r T_r, (A_{\nu})_s T_s] = \\ &= (A_{\mu})_r (A_{\nu})_s [T_r, T_s] = C_{rst} (A_{\mu})_r (A_{\nu})_s T_t \end{aligned}$$

Terminiamo con le equazioni del moto per i campi di Yang-Mills. L'azione e'

$$(9.3.20) \quad S[A_{\mu}] = -\frac{1}{2e_0^2} \int d^4x \text{Tr}\{F_{\mu\nu}(x) F^{\mu\nu}(x)\}$$

[5] I campi di gauge dei quali stiamo scrivendo la lagrangiana "libera" si dicono **campi di Yang-Mills**.

[6] Si rammenti che per un'algebra di Lie semisemplice di un gruppo G compatto si possono sempre scegliere i generatori in modo che $\text{Tr}\{T_r\} = 0$ e $\text{Tr}\{T_r T_s\} \propto \delta_{rs}$.

Le equazioni del moto sono naturalmente date da

$$(9.3.21) \quad \frac{\delta S}{\delta (A^\tau(x))_i} = 0$$

Ora si ha

$$\delta F^{\mu\nu} = (\delta A^\mu)^\nu - (\delta A^\nu)^\mu + [\delta A^\mu, A^\nu] + [A^\mu, \delta A^\nu]$$

mentre, per le proprietà cicliche della traccia,

$$\delta \{ \text{Tr}(F_{\mu\nu} F^{\mu\nu}) \} = 2 \text{Tr} \{ F_{\mu\nu} \delta(F^{\mu\nu}) \}$$

così

$$\begin{aligned} \frac{\delta S}{\delta (A^\tau(x))_i} &= - \frac{1}{e_0^2} \int d^4 y [F_{\mu\nu}(y)]_j \frac{[\delta F^{\mu\nu}(y)]_j}{\delta (A^\tau(x))_i} = \\ &= - \frac{1}{e_0^2} \int d^4 y \{ [F_{\mu\nu}(y)]_j \delta_\tau^\mu \delta^\nu(x-y) \delta_{ij} - \delta_\tau^\nu \delta^\mu(x-y) \delta_{ij} + \\ &\quad + [\delta_\tau^\mu \delta(x-y) \delta_{ij}, A^\nu(y)] + [A^\mu(y), \delta_\tau^\nu \delta(x-y) \delta_{ij}] \} \\ &= - \frac{2}{e_0^2} \{ [F_{\tau\nu}^\nu(x)] + [F_{\tau\nu}(x), A^\nu(x)] \} \end{aligned}$$

E dunque $\delta S = 0$ equivale alla condizione

$$(9.3.22) \quad F_{\tau\nu}^\nu(x) + [F_{\tau\nu}(x), A^\nu(x)] = 0$$

vale a dire

$$(9.3.23) \quad [D_\nu, F_{\nu\tau}(x)] = 0$$

e questa è l'equazione del moto in una forma molto concisa. Si noti che $F_{\tau\nu}^\nu = 0$ perché gli indici bassi sono antisimmetrici, mentre quelli alti sono simmetrici. In questo modo la quantità

$$j_\tau(x) =: F_{\tau\nu}^\nu(x)$$

(che è uguale a $- [F_{\tau\nu}(x), A^\nu(x)]$ in virtù dell'equazione del moto) è una corrente conservata.

CAPITOLO 10

CAMPI DI YANG E MILLS EUCLIDEI

10.1 INTRODUZIONE

Come già detto nei capitoli 6 e 7 una teoria euclidea permette da un lato di definire l'integrale di Feynman-Kac in termini di una teoria della misura coerente e rigorosa dal punto di vista matematico, mentre d'altro canto esiste una connessione ben precisa con quantità fisiche misurabili (si vedano gli esempi del capitolo V). In termini più precisi una teoria euclidea sostituisce l'evolvente temporale usuale $\exp\{i\hat{H}t\}$ con l'evolvente $\exp\{-\hat{H}t\}$ (rinunciando alla struttura gruppale dell'evoluzione temporale in cambio di una buona definizione dell'integrale funzionale). La connessione con la fisica si può vedere a livello elementare, ad esempio per un problema unidimensionale, studiando l'elemento di matrice $\langle x_f | \exp\{-\hat{H}t\} | x_i \rangle$. Seguendo una procedura tipica, simile a quella dei capp. 6 e 7, si vede che questo elemento di matrice contiene informazioni circa tutti gli autostati di \hat{H} con relativi residui, ma in pratica, volendo fare un esempio banale, può essere sufficiente osservare che al limite $t \rightarrow \infty$ lo stato fondamentale sarà quello dominante, dato che

$$\langle x_f | \exp\{-\hat{H}t\} | x_i \rangle = \exp\{-E_0 t\} \left\{ \sum_n \langle x_f | n \rangle \langle n | x_i \rangle \exp\{-(E_n - E_0)t\} \right\}$$

con $E_n - E_0 > 0$ per $n \neq 0$, dimodoché al limite

$$\langle x_f | \exp\{-\hat{H}t\} | x_i \rangle \sim \langle x_f | 0 \rangle \langle 0 | x_i \rangle \exp\{-E_0 t\}$$

D'altro canto $\langle x_f | \exp\{-\hat{H}t\} | x_i \rangle$ si può scrivere in termini di path integrals pur di porre

$$(10.1.1) \int \mathcal{D}[x] e^{i \int dt [\dot{x}^2/2m - V(x)]} \rightarrow \int \mathcal{D}[x] e^{-\int dt [\dot{x}^2/2m + V(x)]}$$

Il limite classico è naturalmente dato dal metodo della fase stazionaria, cioè

$$(10.1.2) \quad \langle x_f | \exp\{-\hat{H}t\} | x_i \rangle \approx \exp\{-S[x_0]\}$$

ove x_0 è la soluzione di

$$(10.1.3) \quad \frac{\delta}{\delta x(t)} \int dt \left[\frac{\dot{x}^2}{2m} + V(x) \right] = 0 \implies m \ddot{x} - V(x) = 0$$

con le opportune condizioni al contorno. È da sottolineare il fatto che questo corrisponde alle equazioni del moto classiche con il **potenziale rovesciato**.

Se un potenziale $V(x)$ è tale da avere un solo minimo in $x=0$ e tale che $V(0)=0$ (condizioni ottenibili con una traslazione e con l'aggiunta di una costante opportuna) allora l'unica soluzione della (3) corrispondente a un'azione finita sarà $x(t)=0$, che corrisponde a una azione classica $S_0=0$. Se $V(x)$ è simmetrico, cioè $V(x)=V(-x)$ e ha 2 minimi in $\pm a$, allora non solo esistono le due soluzioni $x(t)=\text{cost}=\pm a$, corrispondenti ad una azione nulla, ma esiste anche una traiettoria classica $x(t)$ tale che $x(-\infty)=-a$ e $x(+\infty)=+a$ (istantone) con azione non nulla (strettamente positiva). Ovviamente tale traiettoria è permessa nella teoria euclidea (cioè con il potenziale rovesciato), mentre è proibita nella teoria di partenza. Fisicamente corrisponde ad un effetto tunnel tra i due minimi del potenziale. Si noti che le soluzioni istantoniche provengono dall'aver fatto variare anche le condizioni al contorno nell'integrale funzionale. In

altre parole tali soluzioni provengono da un integrale funzionale non condizionato.

10.2 L'AZIONE DI YANG-MILLS EUCLIDEA

Cerchiamo di applicare l'idea precedente al caso del campo di Yang-Mills libero. Scriviamo cioè

$$(10.2.1) \quad S^{YM} = \int d^4x \operatorname{Tr} F_{\mu\nu} F^{\mu\nu}$$

avendo ovviamente richiesto una metrica euclidea e trascurato le costanti di accoppiamento. E' chiaro che in una teoria euclidea

$$(10.2.2) \quad S^{YM} \geq 0$$

e che le soluzioni stazionarie si ottengono da

$$(10.2.3) \quad \delta S^{YM} = 0$$

Una soluzione particolare, del tutto ovvia, e'

$$(10.2.4) \quad F_{\mu\nu} = 0$$

che naturalmente otteniamo non solo da $A_\mu = 0$, ma anche da tutti i campi A_μ del tipo

$$(10.2.5) \quad A_\mu(x) = g(x) \partial_\mu g^{-1}(x)$$

ove $g(x)$ e' una funzione (almeno) continua e derivabile a valori sul gruppo di gauge. Questa soluzione corrisponde ovviamente al caso di azione nulla:

$$(10.2.6) \quad S^{YM} = 0$$

L'analogia con le soluzioni descritte nel paragrafo precedente e' ovvia: ci troviamo di fronte alla soluzione nulla del campo. Cio' che vale la pena di rilevare e' che c'e' un'intera varieta' nello spazio funzionale delle A_μ corrispondente al minimo di S . Questo c'era da aspettarselo fin dal principio dato che S non e' alterata da una trasformazione di gauge. Il problema che vogliamo affrontare e' pero' se tale soluzione e' "unica" (a meno naturalmente di una trasformazione di gauge), se cioe' non esiste un'altra configurazione $F_{\mu\nu}$ del campo non nulla, associata ad un'azione $S^{YM} > 0$ (strettamente) ma tale da rendere ugualmente stazionaria l'azione (in altre parole se non esistono istantoni).

Prima di affrontare il problema della ricerca del minimo dobbiamo caratterizzare meglio la classe delle funzioni sulla quale dovremo fare poi la variazione. Anzitutto restringeremo il campo delle $F_{\mu\nu}$ a quelle che danno un'azione finita (condizione questa necessaria se si vogliono fare ragionamenti semiclassici). Facciamo l'ipotesi (semplificativa, ma assai piu' restrittiva del necessario) che $F_{\mu\nu}$ sia sviluppabile, asintoticamente, in potenze di $1/r$, con $r^2 = x_\mu x^\mu$, ovviamente per $r \rightarrow \infty$. Allora

$$(10.2.7) \quad S = \operatorname{Tr} \int d^4x F_{\mu\nu} F^{\mu\nu} < \infty \implies F_{\mu\nu} = \mathcal{O}(1/r^2)$$

Di qui naturalmente non segue $A_\mu = \mathcal{O}(1/r^2)$ ma

$$(10.2.8) \quad A_\mu = \mathcal{O}(1/r^2) + g(x) \partial_\mu g^{-1}(x)$$

ove $g(x)$ e' una generica funzione a valori sul gruppo di gauge ma beninteso definita per valori di r grandi ($\rightarrow \infty$). Non c'e' bisogno cioe' che $g(x)$ sia definita su tutto \mathbb{R}^4 perche' sia riprodotta la (7), che e' solo una proprieta' locale. In altre parole basta che g sia una funzione definita su una sfera di raggio infinito (e al piu' in un piccolo strato attorno a

detta sfera per i casi in cui vogliamo poter fare anche le derivate radiali). Se specifichiamo il gruppo di gauge ad essere SU(2) ci interessa, nella (8), una applicazione

$$g : S^3 (r \rightarrow \infty) \rightarrow SU(2)$$

Ripetiamo che se g e' definita su detta sfera ed ivi continua ed invertibile allora la (8) implica necessariamente la (7).

Il motivo per cui ci siamo ristretti a SU(2) e' che lo spazio dei parametri del gruppo SU(2) e' un gruppo a 3 parametri (ad esempio gli angoli di Eulero) definiti in un sottoinsieme compatto di \mathbb{R}^3 con inoltre la condizione che una rotazione di 4π deve essere coincidente con la rotazione nulla. Questo fa si' che lo spazio dei parametri di SU(2) sia topologicamente equivalente ad una sfera in 4 dimensioni. Dunque ci interessa un automorfismo di S^3 su S^3 :

$$g : S^3 \rightarrow S^3$$

ove il primo S^3 e' la sfera all'infinito nello spazio euclideo ed il secondo e' lo spazio dei parametri di SU(2).

Il problema che ci poniamo ora e' se esiste una trasformazione di gauge tale che

$$A_\mu = g(x) \partial_\mu g^{-1}(x) + \mathcal{O}(1/r^2) \rightarrow A'_\mu = \mathcal{O}(1/r^2)$$

naturalmente tale relazione dovendo valere per grandi r .

Sia allora $h(x)$ una trasformazione di gauge definita su tutto \mathbb{R}^4 ed ivi derivabile. Allora

$$(10.2.9) A_\mu \rightarrow A'_\mu = h A_\mu h^{-1} + h \partial_\mu h^{-1} = h g \partial_\mu [(hg)^{-1}] + \mathcal{O}(1/r^2)$$

da cui appare chiaro che basta porre $h = g^{-1}$ ed il gioco e' fatto, purché però la funzione g che noi abbiamo definita sulla sola sfera all'infinito possa essere estesa ad una funzione definita su tutto \mathbb{R}^4 ed ivi continua (ovvio dato che h deve essere addirittura derivabile). Se allora tale h esiste, avrà una restrizione su $S^3(r=\infty)$. Siccome h e' continua possiamo dire che facendo variare il raggio della sfera da un r (eventualmente tendente all'infinito) a $r-\delta r$ la funzione h definita sulla sfera deve deformarsi con continuita'.

Definizione: Due funzioni f e g definite tra due spazi topologici si dicono **omotopiche** se una puo' essere trasformata nell'altra per mezzo di una deformazione continua. Chiaramente la relazione di omotopia e' una relazione di equivalenza e quindi potremo dire alternativamente che f e g appartengono alla stessa classe di omotopia.

Con tale definizione dire che h e' continua equivale a dire che le restrizioni di h su due sfere $S^3(r_1)$ e $S^3(r_2)$ sono due funzioni omotopiche. Cio' e' vero per ogni r . Dunque da un lato possiamo mandare r_1 all'infinito e concludere che una restrizione di h a una sfera deve essere omotopica a g^{-1} , e dall'altro possiamo mandare r_2 a 0. Ma siccome h e' continua, la restrizione di h ad una sfera di raggio nullo e' ovviamente una costante non nulla (per garantire l'invertibilita'). Dunque per la proprieta' transitiva g^{-1} deve essere omotopica ad una costante. Siccome poi una costante puo' essere trasformata con continuita' nell'identita' segue che g^{-1} e di conseguenza g (beninteso su S^3) devono stare nella medesima classe di omotopia dell'identita'.

Dunque riassumendo abbiamo dimostrato che $A_\mu = g \partial_\mu g^{-1} + \mathcal{O}(1/r^2)$ puo' essere ricondotto (via trasformazione di gauge) a un $A'_\mu = \mathcal{O}(1/r^2)$ se e solo se $g(x)$ su $S^3(r=\infty)$ e' omotopica all'identita'.

10.3 WINDING NUMBER SU U(1)

Il problema lasciato aperto dal paragrafo precedente e' chiaramente quello di vedere se e quando $g(x)$ puo' essere omotopico all'identita'. Cio' puo' essere visto assai meglio, anche graficamente, in un modello semplificato come l'elettrodinamica in due dimensioni. Allora tutto rimane come prima salvo che il gruppo di gauge sara' $U(1)$ e la sfera all'infinito sara' $S^1(r=\infty)$, cioe' un semplice cerchio. Lo spazio dei parametri di $U(1)$ sara' $[0, 2\pi]$, con 0 e 2π identificati e quindi e' di nuovo un cerchio S^1 . Alcune applicazioni tipiche $g : S^1 \rightarrow S^1$ sono:

$$(10.3.1) \quad g^{(0)}(\theta) = 1$$

$$(10.3.2) \quad g^{(1)}(\theta) = e^{i\theta}$$

$$(10.3.3) \quad g^{(n)}(\theta) = [g^{(1)}(\theta)]^n = e^{in\theta}$$

(si noti che in (3) n e' un intero perche' $g(0)=g(2\pi)$). n prende il nome di **winding number**. E' evidente che per $n \neq 0$ tali curve non sono omotopiche all'identita'. Descriviamo ad esempio \mathbb{R}^2 in coordinate polari ed estendiamo g a tutto \mathbb{R}^2 ad esempio in maniera banale:

$$g(r, \theta) = e^{in\theta}$$

e' evidente che l'origine e' un punto singolare. Possiamo bensì alterare la singularita' ma non eliminarla. Infatti l'unico modo per eliminarla sarebbe moltiplicare l'esponenziale per r o qualcosa di analogo, che pero' implicherebbe $g(r=0)=0$, il che e' impossibile perche' su g richiediamo anche l'invertibilita'. Questo ci da' un'idea di cio' che succede in pratica, naturalmente rinunciando a un trattamento matematico rigoroso: semplicemente $A = g \partial_\mu g^{-1}$ e' una funzione che puo' essere singolare nell'origine. Ne' segue che $F_{\mu\nu} = 0$ ovunque tranne che a $r=0$ ove $F_{\mu\nu}$ e' singolare. Allora l'integrale d'azione riceverà un contributo nullo da tutti i punti dello spazio tranne che dall'origine, dove sara' concentrata tutta la densita' di lagrangiana. In altre parole il campo ha una sorta di "carica topologica" nell'origine, che fa si' che l'azione possa nel complesso essere non nulla.

n e' dato da

$$(10.3.4) \quad n = \frac{i}{2\pi} \int_0^{2\pi} d\theta \, g \frac{d}{d\theta} g^{-1}$$

che e' banalmente verificato dalle nostre funzioni g . Dimostriamo ora che se $g(\theta)$ e' deformata con continuita' n resta invariato. Proviamo ovviamente con una deformazione infinitesima, che per comodita' scriviamo come

$$\delta g = i \lambda g$$

con λ infinitesimo reale definito su S^1 (e quindi con le condizioni al contorno $\lambda(0) = \lambda(2\pi)$). Un calcolo immediato mostra che

$$(10.3.5) \quad \delta \left(g \frac{d}{d\theta} g^{-1} \right) = -i \frac{d\lambda}{d\theta}$$

Ne segue, usando la condizione di periodicitá di λ ,

$$(10.3.6) \quad \delta n = \frac{i}{2\pi} \int_0^{2\pi} d\theta \, \delta \left(g \frac{d}{d\theta} g^{-1} \right) = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} d\theta \, \frac{d\lambda}{d\theta} = 0$$

Da questa relazione segue che la definizione (4) puo' essere estesa a qualunque funzione e caratterizza la classe di omotopia. Naturalmente la dimostrazione non e' rigorosa, perche' manca un punto importante, se cioe' tutte le classi di omotopia sono descritte dalle nostre funzioni $g^{(n)}(\theta)$. Diamo questo fatto per scontato senza provarlo, ma ci limitiamo a renderlo plausibile osservando che n conta in pratica il numero di giri che fa la funzione intorno all'origine, e che questa e' una caratteristica topologica della funzione.

Diamo una proprieta' delle classi di omotopia che ci sara' utile in seguito: se $g = g_1 \cdot g_2$, allora $n = n_1 + n_2$ (con ovvio significato dei simboli). Questa proprieta' potrebbe essere dimostrata in maniera diretta, riconducendo le g al loro archetipo (3) e calcolando esplicitamente n , ma una simile procedura sarebbe troppo caratterizzata dall'essere $U(1)$ il gruppo di gauge. Un'altra tecnica di dimostrazione assai piu' facilmente generalizzabile e' la seguente: deformiamo g_1 con continuita' in modo che $g_1 = 1$ per $0 < \theta < \pi$, in modo che tutto il contributo al winding number venga dall'altro mezzo cerchio, e similmente deformiamo g_2 in modo che $g_2 = 1$ per $\pi < \theta < 2\pi$. Allora

$$n = \frac{i}{2\pi} \int_0^\pi d\theta g_2 \frac{d}{d\theta} g_2^{-1} + \frac{i}{2\pi} \int_\pi^{2\pi} d\theta g_1 \frac{d}{d\theta} g_1^{-1}$$

Siccome quando $g_{1,2} = 1$ non c'e' contributo all'integrale, in entrambi gli integrali e' contenuto l'intero contributo al winding number di g_2 e di g_1 . Di conseguenza gli integrali al 2° membro sono rispettivamente n_2 ed n_1 , da cui segue il teorema.

10.4 WINDING NUMBER SU SU(2)

Ritorniamo al caso di $SU(2)$, con $g : S^3 \rightarrow SU(2)$. Sappiamo che un generico elemento di $SU(2)$ si puo' scrivere come

$$(10.4.1) \quad g = a + i b$$

con $a^2 + b^2 = 1$, il che mostra se ancora era necessario come lo spazio dei parametri di $SU(2)$ sia isomorfo a una sfera in 4 dimensioni. Definiamo anche qui delle funzioni "tipo":

$$(10.4.2) \quad g^{(0)}(x) = 1$$

$$(10.4.3) \quad g^{(1)}(x) = [x_4 + i \sigma \cdot x] / r$$

$$(10.4.4) \quad g^{(n)}(x) = [g^{(1)}(x)]^n$$

Osserviamo che $g^{(1)}(x)$ e' l'applicazione identica da S^3 a S^3 (mentre $g^{(0)}(x)$ e' caso mai l'applicazione nulla, lo zero). Definiamo il winding number come

$$(10.4.5) \quad n = \frac{1}{24\pi^2} \frac{1}{d} \int d\theta_1 d\theta_2 d\theta_3 \text{Tr} \epsilon_{ijk} g \partial^i g^{-1} g \partial^j g^{-1} g \partial^k g^{-1}$$

ove d e' la dimensionalita' della rappresentazione in cui sono definite le g (nel caso precedente $U(1)$ la dimensionalita' era 1, perche' $U(1)$ e' abeliano), le θ_i sono i parametri del gruppo, comunque scelti, e $\partial_i = \partial / \partial \theta_i$. Si noti che la (5) non dipende dalla particolare scelta dei parametri del gruppo. Se infatti facciamo un cambiamento di variabile lo Jacobiano proveniente da $\prod d\theta_i$ e' compensato esattamente dalla trasformazione di $\epsilon_{ijk} \partial^i \partial^j \partial^k$.

Teorema: n e' un invariante topologico.

Infatti sia $\delta g = g \lambda^{\wedge}(x) T_{\wedge} = g \delta T$ (con λ^{\wedge} infinitesime e che obbediscono alle consuete condizioni di periodicita'). Allora si trova banalmente

$$\delta(g \partial_{\wedge} g^{-1}) = -g(\partial_{\wedge} \delta T)g^{-1}$$

Usando la proprieta' ciclica della traccia si ha

$$\delta n \propto \int d\theta_1 d\theta_2 d\theta_3 \varepsilon^{ijk} \text{Tr} \partial_i g^{-1} g \partial_j g^{-1} g (\partial_k \delta T)$$

e dalla identita'

$$0 = \partial_i (g g^{-1}) = g \partial_j g^{-1} + (\partial_j g) g^{-1}$$

segue ancora

$$\delta n \propto \int d\theta_1 d\theta_2 d\theta_3 \varepsilon^{ijk} \text{Tr} \partial_i g^{-1} \partial_j g \partial_k \delta T$$

Integriamo per parti su θ_{\wedge} . Il termine finito si annulla per le condizioni al contorno su λ^{\wedge} , mentre l'integrale rimanente avra' un $\partial_j \partial_i$ oppure un $\partial_i \partial_j$ e questo e' annullato dall'antisimmetrizzatore ε^{ijk} . Quindi

$$\delta n = 0$$

Di conseguenza n e' caratterizzato solo dalle proprieta' topologiche di g .

A questo punto basta calcolare n sulle $g^{(n)}(x)$ (dando per scontato che non esistono altre possibilita', cosa questa che trascuriamo di dimostrare per non cadere troppo nella matematica). E' chiaro per $g^{(0)}(x)$ si ha $n=0$.

Quanto a $g^{(1)}$, questo e' l'applicazione identica, e dunque e' costante su tutta la sfera. Basta quindi calcolarlo in un punto e moltiplicare per la superficie della sfera, che e' $2\pi^2$. E' tuttavia inutile dire che i coefficienti di normalizzazione del winding number sono scelti in modo che $g^{(1)}$ abbia winding number 1. Infine anche qui vale la proprieta' che se $g = g_1 \cdot g_2$, allora $n = n_1 + n_2$ (la dimostrazione data nella sezione precedente era non casualmente sufficientemente generale da poter essere usata anche in topologie piu' complicate). Dunque $g^{(n)}(x) = g^{(1)}(x) \dots g^{(1)}(x)$ implica che il winding number e' $1 + \dots + 1 = n$.

Riassumiamo allora quello che abbiamo scoperto. La condizione $S < \infty$ impone per A_{\wedge} un andamento asintotico del tipo $g(x) \partial_{\wedge} g^{-1}(x) + \mathcal{O}(1/r^2)$. I vari $g(x)$ sono caratterizzati dal loro winding number. Dati due andamenti asintotici $g(x) \partial_{\wedge} g^{-1}(x)$ e $h(x) \partial_{\wedge} h^{-1}(x)$ questi sono equivalenti, nel senso che possono essere trasformati l'uno nell'altro per trasformazioni di gauge, se e solo se g e h appartengono alla stessa classe di omotopia, cioe' se hanno lo stesso winding number. Dato che una trasformazione di gauge non puo' alterare la fisica (cioe' il valore dell'azione) ne segue che le proprieta' fisiche asintotiche di A_{\wedge} sono governate dal solo winding number.

10.5 CONNESSIONE TRA A_{\wedge} E WINDING NUMBER.

Come abbiamo visto il winding number caratterizza le proprieta' asintotiche di A_{\wedge} . Cerchiamo ora di esprimerlo proprio in termini di A_{\wedge} , o meglio ancora, se ci riesce, in termini di F_{\wedge} , che cosi' e' manifestamente gauge-invariante. Definiamo il vettore

$$(10.5.1) \quad J_{\wedge} = 2/d \varepsilon^{\mu\nu\rho\sigma} \text{Tr} [A_{\nu} \partial_{\rho} A_{\sigma} + 2/3 A_{\nu} A_{\rho} A_{\sigma}]$$

Questo vettore non e' definito a casaccio: da un lato vogliamo proprieta' asintotiche ben precise, in modo da connetterlo in maniera banale con il winding number. Ricordando allora la (10.2.8) e' ovvio che occorrera' un

termine trilineare nei campi. In questo modo, osservando che il primo termine (bilineare) va a zero piu' rapidamente, inserendo l'andamento asintotico si ha

$$(10.5.2) \quad J \xrightarrow{r \rightarrow \infty} \frac{4}{3d} \sum_{\mu, \nu, \rho, \sigma} \text{Tr} [g_{\mu\nu} g^{-1} g_{\rho\sigma} g^{-1} g_{\mu\rho} g^{-1}]$$

Questa relazione ci permette di legare il winding number alle proprieta' asintotiche di J :

$$(10.5.3) \quad n = \frac{1}{32\pi^2} \int d^3 S \hat{r}_\mu J^\mu$$

ove S e' naturalmente la sfera all'infinito e \hat{r}_μ e' il versore perpendicolare alla sfera. L'idea e' ora quella di trasformare l'integrale di superficie in un integrale di volume:

$$\int d^3 S \hat{r}_\mu J^\mu = \int d^4 x \partial_\mu J^\mu$$

Ora e' facile osservare che il primo termine di J_μ e' stato scelto in modo che

$$(10.5.4) \quad \partial_\mu J^\mu = \frac{1}{d} \text{Tr} F_{\mu\nu} \tilde{F}^{\mu\nu}$$

Allora il teorema di Gauss-Green ci porta immediatamente ad esprimere n come un integrale di volume sui campi fisici $F_{\mu\nu}$ e $\tilde{F}^{\mu\nu}$:

$$(10.5.5) \quad \frac{1}{d} \int d^4 x \text{Tr} F_{\mu\nu} \tilde{F}^{\mu\nu} = 32\pi^2 n$$

10.6 Istantoni.

Torniamo ora al problema di minimizzare l'azione. Usiamo ora il fatto che la teoria e' euclidea. Questo ci permette di dire che

$$(10.6.1) \quad \text{Tr} [(F_{\mu\nu} - \tilde{F}_{\mu\nu}) (F^{\mu\nu} - \tilde{F}^{\mu\nu})] \geq 0$$

Di qui segue

$$\text{Tr} (F_{\mu\nu} F^{\mu\nu} + \tilde{F}_{\mu\nu} \tilde{F}^{\mu\nu}) \geq 2 \text{Tr} (F_{\mu\nu} \tilde{F}^{\mu\nu})$$

e siccome $\text{Tr}(F_{\mu\nu}) = \text{Tr}(\tilde{F}_{\mu\nu})$ segue la relazione fondamentale

$$(10.6.2) \quad \text{Tr} (F_{\mu\nu} F^{\mu\nu}) \geq \text{Tr} (F_{\mu\nu} \tilde{F}^{\mu\nu})$$

Naturalmente ci riduciamo ad una eguaglianza se

$$(10.6.3) \quad F_{\mu\nu} = \pm \tilde{F}_{\mu\nu}$$

(in realta' la soluzione col segno + e' ovvia, l'altra si ottiene utilizzando un po' di identita' di Jacobi). Le due soluzioni prendono il nome di soluzioni autoduale e antiautoduale. Nella (2) osserviamo ora che l'integrale di volume del primo membro altro non e' che l'azione (a parte costanti), mentre il secondo membro, come abbiamo visto, in pratica e' il winding number. Allora sistemando tutti i coefficienti si ha

$$(10.6.4) \quad S \geq 8d\pi^2 n$$

Riassumiamo la situazione. Abbiamo visto quanto segue:

1. Se in una usuale teoria (minkovskiana) un potenziale ha due minimi uguali una particella puo' passare dall'uno all'altro per effetto tunnel. L'effetto quantistico e' uno splitting del livello fondamentale.
2. Nel passare alla teoria euclidea dobbiamo porre $V \rightarrow -V$. Troviamo che esistono soluzioni classiche (che rendono stazionaria l'energia anche rispetto alle condizioni al contorno) costanti $x(t) = \pm a$ e in piu' soluzioni istantoniche che corrispondono alla transizione da un minimo all'altro e sono il corrispettivo dell'effetto tunnel nello spazio minkovskiano.
3. Passando alla teoria di Yang-Mills richiediamo che l'azione sia finita. Cio' implica $A_\mu = g \partial_\mu g^{-1} + \mathcal{O}(1/r^2)$.
4. I campi A_μ sono caratterizzati (suddivisi in classi di equivalenza) dal loro winding number, e cosi' pure $F_{\mu\nu}$.
5. Siccome una variazione continua di A_μ non altera n , ne segue che potremo minimizzare S separatamente in ciascun settore a winding number definito, ottenendo naturalmente diversi stati stazionari, caratterizzati da n .

6. Se la teoria e' euclidea allora per ogni classe di equivalenza

$$S \geq 8 \pi^2 n$$

e l'uguale vale per

$$F_{\mu\nu} = \pm \tilde{F}_{\mu\nu}$$

Dunque $n=0$ significa $S=0$ e quindi equivale, nel caso minkovskiano, alla soluzione costante intorno al minimo del potenziale (che ovviamente e' $F_{\mu\nu}=0$); i casi $n=1,2,3\dots$ equivalgono a soluzioni istantoniche in cui il sistema (minkovskiano) transisce per effetto tunnel, da un minimo all'altro. Esistono cioe' una infinita' di minimi (nel linguaggio della meccanica quantistica stati fondamentali) attorno ai quali si puo' sviluppare una teoria delle perturbazioni. In altre parole esistono infiniti vuoti degeneri caratterizzati dal winding number.

7. Naturalmente l'effetto tunnel rimuove la degenerazione, a prezzo di introdurre un nuovo parametro. Cio' avviene in analogia con il caso del potenziale periodico in un metallo, dove gli infiniti punti di minimo tutti degeneri sono trasformati in una banda. Nel nostro caso si puo' dimostrare che la densita' di energia E/V dipende da un parametro (θ) e che e' data da

$$(10.6.5) \quad E/V = \cos \theta \exp[-S_0]$$

ove S_0 e' l'azione associata a un istantone.

Infine e' possibile trovare una espressione esplicita per l'istantone corrispondente a $n=1$. Infatti Belavin et al. [1] hanno provato che l'equazione

$$F_{\mu\nu} = \tilde{F}_{\mu\nu}$$

[1] A. A. Belavin, A. M. Polyakov, A. S. Schwarz e Yu. S. Tyupkin, Phys. Lett. 59B(1975)85.

ammette come soluzione

$$(10.6.6) \quad A_{\mu} = \frac{r^2}{r^2 + \rho^2} g^{(1)}(x) \partial_{\mu} [g^{(1)}(x)]^{-1}$$

$g^{(1)}$ essendo, come già detto,

$$g^{(1)}(x) = (x_4 + i\sigma \cdot \mathbf{x})/r$$

ρ e' una costante legata alla dimensione spaziale dell'istantone.

10.7 GENERALIZZAZIONI.

Per concludere questa discussione diamo solo brevemente alcuni risultati su come le nozioni introdotte si possono estendere a gruppi di gauge diversi.

E' facile provare che se il gruppo di gauge e' U(1) (in 4 dimensioni ovviamente!) ogni applicazione $g : S^3 \rightarrow U(1)$ e' deformabile con continuita' a un punto. In questo caso dunque non ha senso parlare di winding number (o se si preferisce questo e' sempre 0) e in conseguenza l'elettrodinamica non ammette istantoni.

Passando a gruppi di simmetria piu' generali, osserviamo anzitutto che se un gruppo non e' semisemplice, le parti abeliane sono tutte corrispondenti a gruppi U(1), e questi non portano istantoni. Si puo' poi dare un teorema valido per i gruppi semplici, dovuto a R. Bott [2]:

Teorema: Per ogni gruppo di Lie semplice G, ogni applicazione continua $g : S^3 \rightarrow G$ si puo' deformare con continuita' a una applicazione da S^2 a un sottogruppo SU(2) di G.

La conseguenza di questo teorema e' ovvia: tutti i risultati precedenti dati per il gruppo SU(2) si estendono immediatamente, senza nemmeno dover cambiare qualche coefficiente o qualche τ ai casi piu' generali e di piu' comune interesse fisico (ad es. SU(3) di colore).

[2] R. Bott, Bull. Soc. Math. France 84(1950)251