Università di Pisa

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

Anno Accademico 2005/2006

Elaborato finale

LA FORMULA DI KUBO: ASPETTI NON PERTURBATIVI DELLA SUPERCONDUTTIVITÀ

1343

Candidato Emanuele Costa Relatore Chiarissimo Prof. Giovanni Morchio

a Caterina

Introduzione

Lo scopo di questo lavoro è discutere alcuni dei problemi aperti della superconduttività, utilizzando come chiave di lettura l'effetto Meissner.

Nei capitoli 3, 4, dedicati all'introduzione della problematica, discutiamo l'opportunità di scegliere l'effetto Meissner come criterio di superconduttività; riportiamo una derivazione che riconduce, in ambito classico, il "diamagnetismo perfetto" dei superconduttori alla forma peculiare della funzione di risposta in corrente a un campo magnetico esterno. La teoria fenomenologica di London non è altro che un caso particolare di questa analisi. La formula di Kubo permette di calcolare questa funzione di risposta a partire da una descrizione quantistica del mezzo materiale: un sistema di molte particelle caratterizzato da una hamiltoniana e uno stato fondamentale.

Ci riferiremo alla discussione quantistica dell'effetto Meissner tramite la formula di Kubo come al "procedimento di Kubo", o "analisi di Kubo"; questo argomento è ben noto in letteratura [Mahan], [Jones]. Dedichiamo alcune pagine alla discussione dei pregi e difetti di questo approccio alla superconduttività, in relazione ad alcune delle principali teorie esistenti: in particolare, il modello BCS e l'analisi di Weinberg in termini di rottura di simmetria. Il procedimento di Kubo è *model independent*; inoltre, definisce un quadro concettuale ampio e flessibile, all'interno del quale possiamo discutere in termini semplici e ben definiti alcune relazioni fra superconduttività e *gap* (capitolo 8), oppure fra superconduttività e rottura di simmetria (capitolo 6).

La parte principale della tesi è dedicata ad una revisione critica del procedimento di Kubo. In particolare, il lavoro procede su due versanti distinti, ma ugualmente importanti.

Il capitolo 9 è dedicato alla sistemazione logica del procedimento di Kubo. Quest'ultimo viene normalmente presentato come un insieme di prescrizioni, motivate dall'intuizione fisica e dall'analogia con la trattazione del caso classico; ma, a guardar bene, la logica sottostante al procedimento di Kubo sembra dare origine a paradossi e inconsistenze. In realtà, le prescrizioni dell'analisi di Kubo possono essere dedotte in modo naturale nel contesto di una opportuna approssimazione, di tipo Hartree-Fock, per un sistema quantistico di particelle e campo elettromagnetico, linearmente accoppiato a una corrente esterna. Ci sono indizi convincenti per ritenere che questa approssimazione riproduca almeno alcuni degli aspetti essenzialmente non perturbativi della soluzione esatta.

Nei capitoli 6, 7 ci occupiamo dello studio delle proprietà generali della formula di Kubo. Mostriamo che un campo magnetico localizzato sul bordo di una regione estesa, nei sistemi superconduttori, induce effetti di volume, come la comparsa di una densità di energia o di corrente non nulle all'interno della regione: è un'evidenza della formazione di correlazioni a lungo raggio. La manifestazione di queste correlazioni a lungo raggio è riconducibile alla presenza di un termine non locale, singolare a piccoli impulsi, nella funzione di risposta di Kubo. Discutiamo anche la relazione fra superconduttività (nel senso dell'effetto Meissner) e rottura spontanea di simmetria, limitatamente a sistemi relativistici, per i quali la non località della funzione di risposta di Kubo equivale alla presenza di un modo di Goldstone nello spettro di massa della sola materia.

Nel capitolo 7 applichiamo l'analisi di Kubo per discutere la superconduttività in sistemi di fermioni liberi e interagenti, in approssimazione di Hartree-Fock. Sono esempi semplici, ma non discussi in letteratura, di mezzi infinitamente conduttori (a temperatura 0), ma che non esibiscono effetto Meissner. Discutiamo a parte anche il modello BCS, che in questa analisi generale si colloca in una posizione un po' anomala.

L'intera trattazione è formulata con un linguaggio il più possibile vicino a quello della teoria assiomatica dei campi, che traduce in modo naturale le proprietà più generali dei sistemi di particelle, e permette di discutere i problemi sollevati in modo essenziale e relativamente preciso.

Indice

| I | Il q | uadro concettuale | 1 |
|----|------------------------------|---|----|
| 1 | Teoria assiomatica dei campi | | |
| | 1.1 | Osservabili | 3 |
| | 1.2 | Stati e rappresentazioni | 7 |
| | 1.3 | Simmetrie e dinamica | 12 |
| | 1.4 | Rottura di simmetria | 16 |
| 2 | Sist | emi elettromagnetici estesi | 19 |
| | 2.1 | Il campo elettromagnetico | 19 |
| | 2.2 | Sistemi di particelle cariche | 23 |
| | 2.3 | Teoria classica e teoria quantistica | 26 |
| II | Те | orie della superconduttività | 29 |
| 3 | Cara | atterizzazione dei superconduttori | 31 |
| | 3.1 | L'effetto Meissner | 31 |
| | 3.2 | La teoria fenomenologica di London | 34 |
| | 3.3 | Criteri di superconduttività | 37 |
| 4 | Teo | rie della superconduttività | 41 |
| | 4.1 | Alcuni modelli teorici | 41 |
| | 4.2 | Il problema della simmetria di gauge locale | 45 |

| II | [L | a formula di Kubo | 49 |
|----|-------|---|-----|
| 5 | Der | ivazione della formula di Kubo | 51 |
| | 5.1 | Teoria della risposta lineare | 51 |
| | 5.2 | La formula di Kubo | 53 |
| | 5.3 | Il procedimento di Kubo | 57 |
| 6 | Asp | etti generali della formula di Kubo | 65 |
| | 6.1 | Regole di somma | 65 |
| | 6.2 | Il problema della gauge | 68 |
| | 6.3 | Risposta di Kubo come effetto di bordo | 71 |
| | 6.4 | Energia di un sistema in campo magnetico | 73 |
| | 6.5 | Energia e corrente gauge-invariante | 75 |
| | 6.6 | Il caso relativistico | 77 |
| 7 | Ese | mpi | 85 |
| | 7.1 | Il gas di Fermi libero | 85 |
| | 7.2 | Il gas di Fermi in approssimazione Hartree-Fock | 92 |
| 8 | Kut | oo e il modello BCS | 101 |
| | 8.1 | Il modello BCS | 101 |
| | 8.2 | Confronto con l'approccio Kubo | 104 |
| 9 | Sul | la fondatezza dell'analisi Kubo | 107 |
| | 9.1 | L'approssimazione di campo classico | 107 |
| | 9.2 | Kubo come problema variazionale | 111 |
| | 9.3 | Un esempio didattico | 116 |
| 10 |) Con | iclusioni | 121 |
| A | Spa | zi di Fock | 123 |
| В | Sta | ti coerenti | 127 |
| С | Dec | composizione spettrale | 131 |

Parte I

Il quadro concettuale

Capitolo 1

Teoria assiomatica dei campi

In questo capitolo introduciamo il formalismo della seconda quantizzazione in un contesto rigoroso, cercando un approccio il più generale, essenziale e preciso possibile. Normalmente, un sistema fisico è caratterizzato dall'insieme delle grandezze osservabili ad esso associate, come l'energia o l'impulso, insieme con la definizione dello stato del sistema, che è l'insieme dei valori numerici delle osservabili, e della dinamica, ovvero una legge che detta l'evoluzione di questi valori numerici nel tempo. Introdurremo le osservabili, gli stati e la dinamica per un sistema di particelle quantistiche; approfondiremo la caratterizzazione degli stati fisicamente rilevanti e la descrizione delle simmetrie.

1.1 Osservabili

I campi quantistici

I sistemi fisici dei quali ci occuperemo sono descritti con un particolare insieme di osservabili, i campi quantistici: esaminiamo qualche aspetto delle loro proprietà matematiche e della loro interpretazione fisica.

Sia h lo spazio delle funzioni test; tipicamente si tratta di funzioni regolari da \mathbb{R}^{ν} in \mathbb{C} . A ogni funzione f associamo il campo $\varphi(f)$, a

valori in uno spazio vettoriale su \mathbb{C} ; l'applicazione

$$f \in \mathfrak{h} \mapsto \varphi(f)$$

è antilineare. Simbolicamente, scriveremo

$$\varphi(\bar{f}) = \int d^{\nu}x \, f(x)\varphi(x)$$

I campi non sono solo uno spazio lineare, ma possono avere una struttura algebrica più ricca: introduciamo le cosiddette algebre ACR e CCR. Una realizzazione "concreta" di gueste strutture, che fra l'altro garantisce la consistenza della costruzione, è descritta nell'appendice A; questo approccio astratto sarà utile per evidenziare alcune caratteristiche generali della teoria. Per le dimostrazioni dei teoremi che seguono, che non riportiamo, si veda [Bratteli II]; per un'introduzione esauriente alla teoria assiomatica, [Haag]. Supporremo che i campi siano (affiliati agli) elementi di una C*-algebra: sui campi è definita un'operazione di prodotto, un'involuzione * e una norma tale che $\|\varphi(f)^*\varphi(f)\| = \|\varphi(f)\|^2$. Costruiamo alcune algebre interessanti come quozienti di questa C*-algebra. Normalmente, i campi sono rappresentati come operatori lineari su uno spazio di Hilbert: gli operatori che formano una C*-algebra devono necessariamente essere limitati. Operatori non limitati possono essere costruiti come limiti opportuni di operatori limitati: fissata una topologia, possiamo discutere i campi non limitati come affiliati a una C*-algebra (si veda oltre la discussione dell'algebra di Weyl).

Supponiamo che per le funzioni test sia definito un prodotto scalare. Consideriamo l'algebra (con identità) \mathfrak{A} generata dalle $\varphi(f)$, con il vincolo

$$\{\varphi(f),\varphi^*(g)\} = \Re \mathfrak{e}(f,g)\mathcal{I}$$
(1.1)

$$\{\varphi(f),\varphi(g)\} = 0 \tag{1.2}$$

per ogni f, g in \mathfrak{h} , ove (f,g) è il prodotto scalare di f e g, \mathcal{I} è l'identità dell'algebra \mathfrak{A} . Le parentesi graffe indicano l'anticummutatore. $\mathfrak{A}(\mathfrak{h})$, o semplicemente \mathfrak{A} , è l'algebra astratta delle ACR. Vale la seguente affermazione:

Teorema 1 l'algebra ACR A è unica a meno di *-isomorfismi.

Questo teorema assicura che l'algebra ACR (una C*-algebra, se $\|\varphi(f)\| = \|f\|$) è un oggetto matematicamente ben definito. Consideriamo

l'algebra (con identità) \mathfrak{A} generata dalle $\varphi(f)$, con il vincolo

$$[\varphi(f),\varphi^*(g)] = i\Im\mathfrak{m}(f,g)\mathcal{I}$$
(1.3)

$$[\varphi(f),\varphi(g)] = 0 \tag{1.4}$$

Le parentesi quadre indicano il commutatore. Queste relazioni definiscono l'algebra CCR. Vale un teorema analogo a quello visto per le algebre ACR:

Teorema 2 l'algebra CCR A è unica a meno di *-isomorfismi.

Quando, per maggiore chiarezza, sarà necessario distinguere esplicitamente se l'algebra \mathfrak{A} sia un'algebra CCR o ACR, aggiungeremo al simbolo dell'algebra un segno – o + rispettivamente. Spesso per discutere l'algebra CCR si introduce l'algebra cosiddetta di Weyl generata dagli elementi

$$W(f) = \exp(i\varphi(f)), \quad f \in \mathfrak{h}$$

su cui si stabiliscono le regole di commutazione

$$W(f)W(g) = e^{-i\Im\mathfrak{m}(f,g)}W(g)W(f)$$

che sono quelle naturalmente ereditate dall'algebra CCR. I campi di Weyl W sono limitati, e dunque generano una C*-algebra: sui campi φ non possiamo definire direttamente una norma C*, e quindi per l'algebra CCR $\varphi(f)$ può solo essere affiliato, nella topologia opportuna, alla C*-algebra di Weyl.

Struttura locale

Mettiamo in evidenza una caratteristica essenziale delle algebre introdotte: queste sono generate, in un senso che sarà precisato, da una rete di algebre "locali". Consideriamo il sottoinsieme aperto limitato $\Lambda \subseteq \mathbb{R}^{\nu}$; con le stesse notazioni già introdotte, chiameremo l'algebra locale $\mathfrak{A}(\Lambda)$ quella generata dai campi $\varphi(f)$, tali che le f sono a supporto in Λ . Notiamo che fra le algebre locali esiste una naturale relazione di ordinamento, ereditata dalla relazione di inclusione sui sottoinsiemi di \mathbb{R}^{ν} . Sono valide le seguenti proprietà:

1. se Λ_1 , Λ_2 sono regioni disgiunte, allora i campi di $\mathfrak{A}(\Lambda_1)$ e i campi di $\mathfrak{A}(\Lambda_2)$ (anti)commutano (località);

2. se $\Lambda_1 \subseteq \Lambda_2$, allora $\mathfrak{A}(\Lambda_1) = \mathfrak{A}(\Lambda_2)|_{\Lambda_1}$ (isotonia).

Possiamo costruire le algebre CCR e ACR nel modo seguente: se \mathfrak{h} è lo spazio delle funzioni test, $\mathfrak{h}(\Lambda)$ il sottospazio delle funzioni test a supporto nella regione limitata $\Lambda \subseteq \mathbb{R}^{\nu}$, allora $\mathfrak{A}(\mathfrak{h})$ è uguale alla chiusura in norma di

$$\bigcup_\Lambda \mathfrak{A}(\Lambda)$$

Diremo che l'algebra è generata dalle osservabili locali. Una differenza fra l'algebra ACR e l'algebra CCR, di carattere essenzialmente tecnico, è che per la prima vale l'uguaglianza

$$\mathfrak{A}_+(\mathfrak{h}) = \mathfrak{A}_+(\mathfrak{h})$$

ove la barra indica il completamento rispetto alla norma pre-Hilbert. Si tratta di una conseguenza della proprietà dell'algebra ACR, per cui la applicazione $f \mapsto \varphi(f)$ è continua in norma; questo non è più vero, in generale, nel caso dell'algebra CCR, su cui non possiamo mettere una norma.

Campi come distribuzioni

I campi che abbiamo introdotto sono essenzialmente delle distribuzioni, ovvero sono una mappa lineare che associa a una funzione test f un elemento $\varphi(f)$ di un'algebra \mathfrak{A} , che può essere un'algebra astratta o, in una rappresentazione concreta, un'algebra di operatori su uno spazio di Hilbert. Possiamo formalmente scrivere

$$\varphi(f) = \int dx \, f(x) \varphi(x)$$

ove la distribuzione $\varphi(x)$ è il campo nel punto x. Questo modo di ragionare è utilissimo perché evidenzia la struttura locale della teoria. Spesso però si abusa della notazione introdotta sopra, per ragioni di comodità, e si lavora direttamente con l'algebra dei campi $\varphi(x)$, ad esempio definendo nuovi campi composti come

$$\rho(x) \equiv \varphi^*(x)\varphi(x)$$

Matematicamente, questo passaggio è illecito, perché moltiplicare due distribuzioni è un'operazione formale non univoca, che necessita di qualche prescrizione. Fisicamente, questo si riflette nelle "divergenze ultraviolette" della teoria; la rinormalizzazione è la prescrizione necessaria per gestire queste divergenze. Fortunatamente, nel caso dei campi liberi, questa prescrizione è estremamente semplice: si tratta del cosiddetto ordinamento normale o di Wick. Tutti i campi liberi composti devono intendersi Wick-ordinati: esprimiamo tutti i campi in termini di operatori di creazione e distruzione a^* , a (si veda la discussione degli spazi di Fock nell'appendice A), eseguiamo il prodotto formale e infine spostiamo tutti gli operatori di creazione a sinistra e tutti gli operatori di distruzione a destra. Concretamente, se

$$\varphi(x) = \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \left[a(k)e^{ik\cdot x} + a^*(k)e^{-ik\cdot x} \right]$$

 $\rho(x) = : \varphi^*(x)\varphi(x) :$

allora

$$= \iint \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \frac{d^3k'}{(2\pi)^3} \left[a(k)a(k')e^{i(k+k')\cdot x} + a^*(k)a(k')e^{i(-k+k')\cdot x} \right. \\ \left. + a^*(k')a(k)e^{i(k-k')\cdot x} + a^*(k)a^*(k')e^{-i(k+k')\cdot x} \right]$$

ove abbiamo indicato con le "parentesi" : ... : l'operazione di ordinamento normale, o di Wick. Nel seguito, quando useremo la notazione impropria per scrivere l'operatore corrente, o l'operatore hamiltoniana, sottintenderemo sempre che i prodotti siano Wickordinati. Tecnicamente, supporremo che, in generale, gli operatori $\varphi(x)$ nel contesto di una qualsiasi rappresentazione possiedano un dominio denso invariante \mathcal{D} , su cui risultano definiti anche tutti gli operatori composti che possiamo costruire.

1.2 Stati e rappresentazioni

Il concetto di stato è estremamente rilevante per caratterizzare una teoria di campo, in quanto determina lo spettro di eccitazioni della teoria. Tale spettro non può essere ricavato dalla sola struttura cinematica di campi, ma dipende in modo essenziale dalle interazioni fra questi, come discuteremo nel paragrafo 1.3 riservato alla dinamica. Infatti, attraverso il concetto (dipendente dalle interazioni) di stato di Fock possiamo ricostruire dai campi un'interpretazione in termini di "particelle", e da queste lo spettro. Notiamo, per inciso, che in sistemi non relativistici si ha già, in generale, una nozione di particelle: ad esempio, gli elettroni e i nuclei che compongono un solido. Di conseguenza, introdurremo in modo naturale i campi associati agli elettroni e ai nuclei. Nonostante questo, le interazioni spesso inducono la formazione di strutture più complesse, come le quasi-particelle o i modi collettivi, che sono oggetti più adeguati per discutere lo spettro e altre proprietà interessanti del sistema [Pines]: la discussione separata di stati, osservabili e dinamica permette di capire l'origine e il significato fisico di queste "particelle" generalizzate.

Uno stato è un funzionale lineare, positivo, normalizzato su una C*algebra \mathfrak{A} . Ogni C*-algebra non commutativa è isomorfa a una certa sottoalgebra di $\mathcal{B}(\mathcal{H})$, l'algebra degli operatori limitati su un opportuno spazio di Hilbert \mathcal{H} . Un omomorfismo π di una C*-algebra astratta in $\mathcal{B}(\mathcal{H})$ è anche detto rappresentazione della C*-algebra, fedele se π è un isomorfismo. A partire da uno stato Ω su \mathfrak{A} si può sempre costruire uno spazio di Hilbert \mathcal{H} e una rappresentazione π di \mathfrak{A} su \mathcal{H} tale che

$$\Omega(A) = (\psi, \pi(A)\psi) \quad \forall A \in \mathfrak{A}$$

ove ψ è un certo vettore fissato in \mathcal{H} (costruzione GNS). Sfruttando la rappresentazione π generata dallo stato Ω , possiamo definire una varietà di altri stati: un operatore di classe traccia ρ su \mathcal{H} definisce uno stato su \mathfrak{A} nel modo seguente

$$\Omega_{\rho}(A) = \frac{Tr(\rho A)}{Tr(\rho)}$$

Gli stati descritti da una matrice statistica ρ di classe traccia fanno parte del *folium* della rappresentazione π . Un risultato di carattere generale dice che la rappresentazione GNS costruita a partire da uno stato Ω_{ρ} , nel folium di π_{Ω} , è quasiequivalente alla rappresentazione π_{Ω} . Quasiequivalente significa che esiste una corrispondenza fra le algebre delle osservabili $\pi(\mathfrak{A})$ e $\pi_{\rho}(\mathfrak{A})$, che conserva sia la struttura algebrica che la struttura topologica. La quasiequivalenza non è necessariamente una equivalenza unitaria fra le due algebre: se decomponiamo la rappresentazione costruita da Ω_{ρ} in componenti irriducibili, queste componenti irriducibili sono le stesse che compaiono nella rappresentazione costruita da Ω , eventualmente con molteplicità diversa. Nei sistemi con un numero finito di gradi di libertà esiste una unica rappresentazione irriducibile dell'algebra canonica (teorema di Von Neumann), e dunque tutte le rappresentazioni sono necessariamente quasiequivalenti, ovvero appartengono allo stesso *folium*. Nei sistemi con infiniti gradi di libertà, come i sistemi descritti da campi quantistici, esistono molte rappresentazioni irriducibili inequivalenti dell'algebra canonica, e dunque molti possibili *folia* fisicamente distinti, talvolta interpretabili come differenti fasi termodinamiche dello stesso sistema [Strocchi b]. Questa osservazione è alla base del concetto di rottura spontanea della simmetria, che discutiamo nel paragrafo 1.4.

Non tutti gli stati che si possono definire sull'algebra \mathfrak{A} sono ritenuti, in generale, fisicamente significativi. Nel seguito descriveremo sistemi di particelle. Una proprietà che si richiede comunemente essere soddisfatta da uno stato "fisico" Ω è la locale normalità, che traduce la richiesta fisica seguente: non è possibile avere un numero infinito di particelle in una regione finita di spazio¹. Per implementare questa richiesta fisica nel nostro formalismo, definiremo una quantità 'numero di particelle', su una regione limitata Λ qualsiasi, cui corrisponda un operatore ben definito nella rappresentazione π_{Ω} associata allo stato "fisico" Ω . Osserviamo che questo approccio include sistemi con infinite particelle, ma densità di particelle finita. Per procedere con questo ragionamento, introduciamo il concetto astratto di rappresentazione di Fock (nell'appendice A ne diamo una rappresentazione concreta).

Consideriamo uno spazio di Hilbert \mathcal{H}_F e una rappresentazione π_F dell'algebra ACR su \mathcal{H}_F ; la costruzione per l'algebra CCR è assolutamente analoga, ma ci sono alcune difficoltà tecniche su cui torneremo alla fine. Sia

$$a(f) \equiv \pi_F(\psi(f)), \quad f \in \mathfrak{h}$$

 π_F è la rappresentazione di Fock dell'algebra ACR dei campi ψ , se sono soddisfatte le proprietà:

- 1. esiste unico $\Omega \in \mathcal{H}_F$ tale che, $\forall f \in \mathfrak{h}, a(f)\Omega = 0$;
- 2. il vettore Ω è ciclico, cio
è l'insieme delle combinazioni lineari di

$$a^*(f_1)\dots a^*(f_n)\Omega, \quad f_1\dots f_n \in \mathfrak{h}$$

è denso in \mathcal{H}_F .

¹si dice anche che gli stati localmente normali "assomigliano al vuoto" in ogni regione di spazio sufficientemente piccola

Ha senso parlare de *la* rappresentazione di Fock, piuttosto che di una rappresentazione di Fock, perché valgono i seguenti:

Teorema 3 due rappresentazioni di Fock dell'algebra ACR sono unitariamente equivalenti.

Teorema 4 la rappresentazione di Fock è irriducibile.

Se $\{f_i\}_{i\in\mathbb{N}}$ è una base ortonormale nello spazio di Hilbert \mathfrak{h} , vorremmo definire l'operatore numero

$$N = \sum_{i=1}^{\infty} a^*(f_i)a(f_i) \quad ;$$

in realtà questo operatore è non limitato, dunque non può essere il rappresentante di un qualche elemento dell'algebra ACR (o della sua chiusura in norma): N può essere definito al più nel contesto di una rappresentazione. In particolare, si può dimostrare che Nè ben definito come limite forte nella rappresentazione di Fock, ed essenzialmente autoaggiunto su un opportuno dominio denso dello spazio di Fock. N è non limitato, quindi non può essere definito come limite in norma: occorre indebolire la topologia per rendere Ncontinuo (limitato) in qualche senso. Si verifica con il calcolo diretto, usando le ACR, che gli stati della forma

$$a^*(f_1)\ldots a^*(f_n)\Omega, \quad f_1\ldots f_n\in\mathfrak{h}$$

sono autostati dell'operatore numero N con autovalore $n \in \mathbb{N}$.

A questo punto possiamo dare un senso all'affermazione iniziale: non deve essere possibile trovare un numero infinito di particelle in una regione di spazio finita Λ . Questa richiesta si traduce in una semplice proprietà dello stato Ω del sistema: lo stato Ω_{Λ} , ottenuto come restrizione dello stato Ω alla regione limitata Λ , è un elemento del *folium* della rappresentazione di Fock, ovvero la rappresentazione GNS di Ω_{Λ} è quasiequivalente alla rappresentazione di Fock. Diciamo in questo caso che Ω è localmente normale.

Per quanto riguarda l'algebra CCR, è preferibile lavorare con l'algebra di Weyl associata, in cui i generatori dell'algebra sono limitati: ovvero, con $\exp(it\varphi(f))$ piuttosto che con $\varphi(f)$. Per ricavare, nel contesto della rappresentazione, gli operatori di creazione e distruzione dai corrispondenti operatori di Weyl $\pi(e^{it\varphi(f)})$, dobbiamo poter derivare rispetto a t: per fare questo, è necessario supporte che la

rappresentazione sia regolare, ovvero gli operatori di Weyl siano fortemente continui nel parametro t per ogni $f \in \mathfrak{h}$. Questo passaggio non è necessario nel discutere l'algebra ACR perché in quel caso gli operatori di creazione e distruzione fanno parte dell'algebra (sono limitati), mentre nel caso dell'algebra CCR possono solo essere affiliati all'algebra, cioè devono essere approssimati con funzioni limitate di elementi dell'algebra, come gli operatori di Weyl.

Per capire il collegamento fra stato e dinamica, anticipiamo qualche risultato del paragrafo 1.3. Supponiamo che esista e sia unico lo stato fondamentale del sistema, invariante rispetto all'evoluzione temporale. Lo stato fondamentale di un sistema realistico è anche localmente Fock, rispetto a un certo insieme di campi che definiscono gli *a*, ovvero gli operatori di distruzione. Può accadere che, se cambiano le interazioni del sistema, il nuovo stato invariante per traslazioni non sia più localmente Fock rispetto allo stesso insieme di campi, cioè in pratica il nuovo stato fondamentale non è annichilato dagli *a*. In questo caso, occorre ridefinire un insieme di campi opportuno rispetto a cui lo stato fondamentale sia localmente Fock. Si veda a questo proposito la discussione del teorema di Haag [Haag].

Ora che abbiamo introdotto gli stati localmente Fock, possiamo suggerire una interpretazione fisica per le osservabili della teoria, cioè i campi, in termini di "particelle". Supponiamo che al campo φ sia associata una certa specie di particelle: sia Ω lo stato di vuoto, nel senso di Fock. Interpretiamo Ω come lo stato senza particelle. Lo stato

$$\varphi^*(f)\Omega \qquad f\in\mathfrak{h}$$

è lo stato di una singola particella, della specie descritta da φ , distribuita nello spazio secondo la "funzione d'onda" $f \in \mathfrak{h}$. Tutti gli stati con un numero finito di particelle possono essere costruiti applicando un opportuno polinomio dei campi allo stato fondamentale Ω ; lo spettro del sistema, ovvero la distribuzione dei livelli energetici, è determinato dalle energie di queste eccitazioni elementari, o "particelle". Infatti, nella misura in cui il sistema può essere descritto in termini di un insieme di "particelle" libere, lo spettro del sistema è immediatamente noto (lo spazio di Fock delle particelle libere è descritto nell'appendica A). Se le "particelle" sono solo approssimativamente libere, possiamo sperare che lo spettro associato sia approssimativamente simile allo spettro libero. I campi fondamentali, come gli elettroni e i nuclei, saranno interpretabili come vere particelle, nel senso che determinano almeno grossolanamente la forma dello spettro, solo se lo stato fondamentale è localmente Fock rispetto ad essi.

1.3 Simmetrie e dinamica

Diremo che una trasformazione

$$\beta:\mathfrak{A}\to\mathfrak{A}$$

dell'algebra delle osservabili \mathfrak{A} in sé è una simmetria (algebrica) se β è uno *-automorfismo, ovvero una applicazione biunivoca che rispetta la struttura algebrica. Una simmetria β è implementata nel contesto di una rappresentazione π se esiste un operatore unitario tale che

$$\pi\left(\beta(A)\right) = U\pi(A)U^* \quad \forall A \in \mathfrak{A}$$

Se non esiste un operatore unitario che implementa la simmetria, diciamo che la simmetria β è rotta spontaneamente nella rappresentazione π . Generalizziamo questo argomento per un gruppo a un parametro di simmetrie β^s ; supponiamo che β^s sia implementato nel contesto di una rappresentazione π da un gruppo di operatori unitari U(s), continui in qualche senso nel parametro s. Diremo che al gruppo di simmetrie β^s è associata la densità di carica ρ se valgono le seguenti affermazioni:

- 1. $\rho(g)$ è un operatore (essenzialmente) autoaggiunto su \mathcal{H} per ogni funzione test $g \in \mathfrak{h}$;
- 2. la carica totale Q associata a ρ genera la simmetria, nel senso che, detta $Q_R \equiv \rho(f_R)^2$, e detta $\delta A = \partial/\partial s \beta^s(A)|_{s=0}$ per $A \in \mathfrak{A}$, vale la relazione

$$\delta A = i \lim_{R \to \infty} [Q_R, A]$$

Osserviamo che, anche se la densità di carica è un operatore ben definito, il suo "integrale" su tutto lo spazio Q_{∞} (la carica totale) può non essere un operatore ben definito. Questo è il caso, ad esempio,

 $^{^2}f_R(x)=f(|x|/R)$ è una funzione test tale che f(y) vale 1 per $0\leq y\leq 1,$ 0 per $y\geq 1+\epsilon$

dei sistemi omogenei con densità di carica non nulla: in questi sistemi la carica totale è infinita. L'osservazione cruciale che permette di trattare anche queste situazioni è che la quantità di interesse non è tanto il limite per $R \to \infty$ di Q_R , ma del suo commutatore con una generica osservabile locale A, che in generale ha proprietà di convergenza migliori: questo permette di non escludere dalla discussione sistemi interessanti.

Un esempio di simmetria, come vedremo subito, è la traslazione (o "evoluzione") temporale, in cui la "carica" è l'hamiltoniana del sistema. La hamiltoniana del sistema si costruisce in effetti come limite di hamiltoniane di volume finito, e può essere non ben definita come operatore; la simmetria (le traslazioni temporali) è comunque implementata nel modo che abbiamo descritto, se risulta definito, nel limite $V \to \infty$, il commutatore dell'hamiltoniana di volume finito H_V con la generica osservabile $A \in \pi(\mathfrak{A})$.

Abbiamo discusso la struttura cinematica dei sistemi di campi, nell'impostazione algebrica. Adesso introduciamo la dinamica, cioè l'evoluzione temporale di questi campi. L'evoluzione temporale è una mappa che manda l'osservabile $A \in \mathfrak{A}$ al tempo 0 nell'osservabile $A_t \in \mathfrak{A}$ al tempo t; supporremo che questa mappa, d'ora in poi indicata con α^t , abbia le seguenti prorpietà:

- 1. preservi la struttura algebrica (α^t è uno *-omomorfismo);
- 2. sia una mappa iniettiva e surgettiva (α^t è uno *-automorfismo): i sistemi dissipativi restano fuori da questo tipo di analisi;
- 3. sia continua in qualche senso nel parametro t.

Normalmente, l'algebra delle osservabili è costruita a partire da una rete di algebre locali, definite su regioni di spazio finite: si veda la discussione sulla struttura locale delle algebre ACR e CCR. Per ogni regione finita Λ definiamo l'automorfismo α_{Λ}^{t} che descrive la dinamica a livello locale (nel linguaggio comune Λ è un taglio infrarosso). Visto che ci restringiamo a considerare stati localmente normali (regolari per le CCR), qualsiasi rappresentazione sarà localmente equivalente alla rappresentazione di Fock; dunque possiamo definire le evoluzioni temporali su una regione finita nel contesto della rappresentazione di Fock corrispondente, nei termini standard di operatore hamiltoniano su uno spazio di Hilbert.

Può sorgere un problema di convergenza nel limite $\Lambda \to \infty$. Ci sono

alcuni casi, come il gas di Fermi libero, in cui le α_{Λ} convergono nella norma dell'algebra a un automorfismo α : la dinamica è svincolata dalla rappresentazione, dunque dal particolare stato in cui si trova il sistema. Più in generale, la dinamica necessita di una regolarizzazione e/o di una rinormalizzazione per essere ben definita; abbiamo già visto un esempio di regolarizzazione con il taglio infrarosso, e un esempio di rinormalizzazione con l'ordinamento di Wick per i campi liberi. Le procedure di regolarizzazione e rinormalizzazione dipendono dalla particolare rappresentazione in cui ci troviamo, e questo fatto rende delicata la discussione della dinamica [Haag].

Tecnicamente, può essere necessario indebolire la topologia per dare significato alla dinamica nel limite di volume infinito: una topologia conveniente può essere quella indotta da una certa classe di stati rilevanti \mathcal{F} , tale che \mathcal{F} sia un *folium* localmente Fock (regolare), sul biduale \mathfrak{A}'' dell'algebra delle osservabili \mathfrak{A} . Un punto delicato, ma anche interessante, è che in una topologia più debole della topologia indotta dalla norma, come $\tau_{\mathcal{F}}$, la chiusura di \mathfrak{A} è in generale più grande della chiusura in norma. In questo senso l'evoluzione temporale può essere delocalizzante: ci obbliga a considerare una estensione dell'algebra dei campi quasilocale introdotta a livello cinematico [Strocchi q].

Consideriamo un sistema non relativistico in rappresentazione di Fock (appendice A). Sia $H = d\Gamma(H_1)$ l'hamiltoniana libera, costruita con l'hamiltoniana libera di singola particella. Può risultare semplice e comodo, anche per aggiungere le interazioni, considerare la versione in seconda quantizzazione dell'operatore hamiltoniano, ovvero la sua espressione in termini di operatori di creazione e distruzione.

Discutiamo a titolo di esempio un sistema omogeneo: l'operatore impulso, che genera le traslazioni spaziali, esiste e commuta con l'operatore hamiltoniano, dunque possiamo scegliere una base di autostati $\{|k, \alpha\rangle\}$ con impulso k, energia $\varepsilon(k, \alpha)$: α sono tutti gli altri eventuali gradi di libertà. Ricordiamo che questa notazione è leggermente impropria. Sia $a(k, \alpha)$ l'operatore di distruzione associato alla funzione test $|k, \alpha\rangle$, per la cui definizione valgono esattamente gli stessi *caveat* stabiliti per gli autostati dell'impulso; formalmente, l'hamiltoniana H in seconda quantizzazione si scrive:

$$H = \sum_{\alpha} \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \varepsilon(k,\alpha) a^*(k,\alpha) a(k,\alpha)$$

che è l'integrale della densità (nello spazio degli impulsi) di hamiltoniana

$$h(k) = \sum_{\alpha} \varepsilon(k, \alpha) a^*(k, \alpha) a(k, \alpha)$$

Questo operatore è una densità nello spazio degli impulsi, rinormalizzata con l'ordinamento di Wick nella rappresentazione definita dal vuoto. La hamiltoniana si definisce come il limite delle hamiltoniane regolarizzate $h(f_R)$, e genera l'evoluzione temporale nel senso che abbiamo discusso, prescindendo dal fatto che l'espressione formale per H faccia senso o meno.

Concludiamo con qualche considerazione sulla costruzione della densità h nel limite di volume infinito. Per semplicità, il sistema sia contenuto in una scatola cubica di volume finito V, l'hamiltoniana libera di singola particella sia l'operatore $-\Delta$, con condizioni al bordo periodiche. Le onde piane sono una base (numerabile) di autovettori per $-\Delta$: la hamiltoniana totale è perfettamente definita, come sommatoria sui valori discreti di k. Nel limite per $V \to \infty$ a densità di particelle N/V costante, cioè nel limite termodinamico, i k della somma sono sempre più fitti: le sommatorie approssimano un integrale su k, nel senso di Riemann, di una opportuna densità di hamiltoniana. Nel seguito, quando studieremo qualche sistema fisico particolare nel limite termodinamico, applicheremo implicitamente questo meccanismo per definire la densità di hamiltoniana del sistema, in termini dei prodotti Wick-ordinati di campi liberi.

Le hamiltoniane locali possono essere definite su qualsiasi stato localmente Fock, come descritto nell'appendice A, e generano la simmetria α_t . Supponiamo che esista e sia unico lo stato Ω invariante per evoluzione temporale:

$$\alpha_t^*(\Omega) = \Omega \quad \forall t \quad .$$

Supponiamo anche che tale stato sia localmente Fock, rispetto a un certo insieme di campi. Diremo che Ω è lo stato fondamentale del sistema. Nella rappresentazione GNS π_{Ω} associata a Ω , esiste un gruppo a un parametro di operatori unitari che implementa l'evoluzione temporale:

$$\pi_{\Omega}(\alpha_t(A)) = U(t)\pi_{\Omega}(A)U^*(t) \; \forall A \in \mathfrak{A}$$

Nelle ipotesi di regolarità necessarie per applicare il teorema di Stone (vedi [Strocchi q]) il gruppo degli U(t) è generato da un operatore

autoaggiunto H, generalmente non limitato, che è la hamiltoniana del sistema; su una regione limitata qualsiasi, H coincide con la corrispondente hamiltoniana di volume finito, a meno di una rinormalizzazione. Naturalmente, H è ben definito solo nel contesto della rappresentazione π_{Ω} . Il suo spettro è lo spettro di energia del sistema. La forma delle interazioni determina, insieme alla richiesta di locale normalità, lo stato fondamentale del sistema: questo determina il contenuto di particelle della teoria e, nella rappresentazione ad esso associata, la hamiltoniana e lo spettro di energia del sistema. La forma dello spettro e il contenuto di particelle della teoria non sono una conseguenza della struttura cinematica del sistema, ma dipendono in modo cruciale dalle interazioni.

1.4 Rottura di simmetria

Per definizione, una simmetria, intesa come automorfismo dell'algebra delle osservabili \mathfrak{A}^3 , è rotta spontaneamente in una rappresentazione π se non esiste un operatore unitario che implementi la simmetria sullo spazio di Hilbert \mathcal{H}_{π} .

La rottura spontanea della simmetria è un fenomeno tipico dei sistemi quantistici estesi che abbiamo introdotto. L'ingrediente fondamentale è la non unicità della rappresentazione dell'algebra delle osservabili: questo fa si che uno stesso sistema fisico, descritto dalle medesime osservabili (e dallo stesso insieme di hamiltoniane locali), possa presentare caratteristiche totalmente differenti a seconda del particolare stato in cui si trova. La magnetizzazione spontanea, la superfluidità sono esempi tipici di fenomeni interpretabili come conseguenze della rottura di certe simmetrie. Per sistemi quantistici con un numero finito di gradi di libertà esiste un'unica rappresentazione delle relazioni di commutazione canoniche (teorema di von Neumann); per questi sistemi non si ha rottura spontanea della simmetria.

Euristicamente, diciamo che nel passaggio da una rappresentazione dell'algebra delle osservabili ad un'altra inequivalente dobbiamo spendere "infinita energia" o aggiungere "infinite particelle", o

 $^{^{3}}$ se il sistema è invariante per traslazioni, di solito si richiede che la simmetria commuti con le operazioni di traslazione.

compiere altre operazioni "non fisiche". Per una discussione tecnicamente approfondita della rottura spontanea della simmetria, si veda [Strocchi b]; per un'introduzione più euristica, [Coleman]. Se lo stato fondamentale Ω è unico, invariante per traslazioni, un modo semplice per vedere se la simmetria β è spontaneamente rotta è controllare se lo stato $\beta^*\Omega$, definito come

$$\beta^*\Omega(A) = \Omega(\beta(A)), \, A \in \mathfrak{A}$$

anch'esso invariante per traslazioni, coincide con Ω : se si, allora esiste un operatore unitario U_{β} che implementa β su \mathcal{H}_{Ω} , altrimenti tale operatore unitario non esiste e β è spontaneamente rotta nella rappresentazione π_{Ω} . In questo caso, sia $A \in \mathfrak{A}$ una osservabile tale che

$$\beta^* \Omega(A) \neq \Omega(A) \quad ;$$

A è un parametro d'ordine della simmetria rotta.

Nel caso di un gruppo a un parametro di simmetrie β^s , $s \in \mathbb{R}$, la discussione diventa particolarmente interessante. Sotto opportune ipotesi per la simmetria β^s vale infatti il teorema di Goldstone, per cui alla rottura spontanea di tale simmetria segue la comparsa nello spettro delle eccitazioni del sistema di alcuni modi collettivi, stabili e a massa nulla, detti modi di Goldstone. Nella fisica dello stato solido ci sono molte "particelle" interpretabili come modi di Goldstone: i fononi, le onde di spin, i magnoni. La rottura di simmetria è un meccanismo molto elegante per interpretare la comparsa di questi modi collettivi.

Discutiamo i dettagli tecnici del teorema di Goldstone. Spesso, questo teorema è presentato in modo piuttosto frettoloso, come una sorta di prescrizione perturbativa [Weinberg II]. In realtà, il teorema di Goldstone è un risultato non perturbativo che si può formulare rigorosamente nel contesto della teoria assiomatica. Preferiamo questa impostazione perché un'applicazione *naif* del teorema di Goldstone genera paradossi: le oscillazioni di plasma, ad esempio, compaiono in seguito alla rottura spontanea della simmetria di Galileo in sistemi omogenei di particelle cariche [MS86], ma hanno massa non nulla. In effetti questi sistemi violano alcune delle ipotesi del teorema di Goldstone, ma le discrepanze non sono spiegabili nell'approccio "euristico" al problema: per risolverle bisogna introdurre altre prescrizioni perturbative, come il meccanismo di Higgs. Per sistemi estesi non relativistici, supponiamo che 1. β^s , $s \in \mathbb{R}$, è gruppo a un parametro di simmetrie interne, ovvero

 $[\beta^s, \alpha_{\vec{x}}] = 0 \quad [\beta^s, \alpha_t] = 0 \quad \forall s \in \mathbb{R}, \, \forall \vec{x} \in \mathbb{R}^3, t \in \mathbb{R} \quad ,$

ove abbiamo indicato con α le operazioni di traslazione;

- 2. su una sottoalgebra \mathfrak{A}_0 dell'algebra delle osservabili \mathfrak{A} , stabile sotto evoluzione temporale α_t , la simmetria β^s è localmente generata da una carica, nel senso descritto nel paragrafo 1.3; sia Q_R la carica locale, a supporto in una sfera di raggio R;
- 3. lo stato invariante per traslazioni Ω definisce una rappresentazione π_{Ω} in cui β^s è rotta spontaneamente, cioè esiste $A \in \mathfrak{A}_0$ tale che

$$\langle \delta A \rangle = \lim_{R \to \infty} \langle i[Q_R, A] \rangle = b \neq 0$$

Allora, vale il seguente

Teorema 5 nella rappresentazione π_{Ω} , esistono eccitazioni stabili nel limite di impulso $\vec{k} \to 0$, con energia $\omega(\vec{k}) \to 0$ nel limite $\vec{k} \to 0$. Gli stati corrispondenti hanno componenti non nulle (numeri quantici) nei sottospazi $\pi(\alpha_t A)\Omega$, $\pi(Q_R)\Omega$ di \mathcal{H}_{π} , per $t, R \in \mathbb{R}$ (teorema di Goldstone).

Una condizione particolarmente cruciale è la stabilità della sottoalgebra \mathfrak{A}_0 sotto evoluzione temporale: una dinamica con forze a lungo raggio più essere sufficientemente delocalizzante per far si che le Q_R che generano la simmetria al tempo 0 non generino più la simmetria al tempo t. Questa è una condizione particolarmente sottile, ma che è determinante se vogliamo campire perché il teorema non si applichi ad esempio per le oscillazioni di plasma.

Altre versioni del teorema di Goldstone possono essere formulate per sistemi relativistici o per sistemi termodinamici, descritti con il formalismo KMS.

Capitolo 2

Sistemi elettromagnetici estesi

In questo capitolo descriviamo sistemi infinitamente estesi di particelle cariche, che interagiscono attraverso il campo elettromagnetico, con la teoria quantistica dei campi. Questo tipo di oggetti è il modello più "elementare", costruito di soli ingredienti "fondamentali", di un mezzo materiale. In linea di principio, i sistemi infiniti permettono di studiare le proprietà di *bulk* del sistema di interesse, trascurando gli effetti del "bordo".

I mezzi materiali possono essere schematizzati anche nel contesto dell'elettromagnetismo classico, le loro proprietà riassunte in alcune grandezze come la costante dielettrica ε . Spesso le teorie fenomenologiche dei mezzi materiali, fra cui la superconduttività, sono formulate a cavallo fra la teoria classica e la teoria quantistica; per questo, il quadro concettuale dev'essere definito con molta cura per evitare confusione.

2.1 Il campo elettromagnetico

Classicamente, il campo elettromagnetico è descritto da una coppia di campi vettoriali, il campo elettrico E e il campo magnetico B, che (nel vuoto) obbediscono alle equazioni di Maxwell

$$\nabla \wedge E = -\partial B / \partial t \qquad \nabla \cdot B = 0$$
$$\nabla \cdot E = 4\pi \rho \qquad \nabla \wedge B = 4\pi j + \partial E / \partial t \quad .$$

 ρ , *j* sono la densità di carica e la densità di corrente, e obbediscono all'equazione di continuità. In un dominio semplicemente connesso, il campo elettromagnetico (in presenza di sorgenti) può essere descritto efficacemente attraverso queste variabili. Può essere conveniente introdurre dei potenziali, il potenziale scalare ψ e il potenziale vettore *A*, da cui si ricavano i campi elettrici e magnetici

$$E = -\nabla \psi - \partial A / \partial t \qquad B = \nabla \wedge A$$

I campi ottenuti risolvono automaticamente le equazioni di Maxwell omogenee, e le equazioni inomogenee diventano equazioni differenziali del secondo ordine per i potenziali. L'uso dei potenziali è addirittura necessario per formulare una teoria hamiltoniana di particelle cariche (o di un fluido carico) interagenti con il campo elettromagnetico. L'accoppiamento fra materia e campo elettromagnetico è dato dal cosiddetto accoppiamento minimale:

$$p \longrightarrow p - eA$$

ove p è l'impulso della particella che compare nella hamiltoniana senza il campo elettromagnetico. Questa prescrizione riproduce la formula di Lorentz per la forza agente sulle particelle:

$$F = e(E + v \wedge B) \quad .$$

Notiamo che il potenziale vettore è definito a meno del gradiente di una funzione scalare arbitraria Λ (arbitrarietà di gauge):

$$A \longrightarrow A + \nabla \Lambda$$

cui si affianca una corrispondente trasformazione per il potenziale scalare

$$\psi \longrightarrow \psi - \partial \Lambda / \partial t \quad ;$$

i campi *E*, *B* non cambiano se *A*, ψ trasformano in questo modo. Per definire correttamente l'evoluzione temporale dei potenziali come un problema di Cauchy, è necessario fissare dei vincoli che eliminino l'arbitrarietà di gauge, ovvero fissare la gauge. A livello classico l'arbitrarietà di gauge ammette una interessante visualizzazione geometrica: il potenziale vettore è visto come connessione su una varietà differenziabile, l'arbitrarietà nel fissare la gauge corrisponde all'arbitrarietà nella scelta delle coordinate.

Sul piano quantistico, l'introduzione dei campi di gauge è per certi versi problematica. Campi carichi, come il campo dell'elettrone, non possono essere ritenuti a tutti gli effetti "osservabili", nel senso descritto in [Streater]; tuttavia, non è ovvio come si possa formulare una versione utilizzabile della QED o di altre teorie di gauge senza sfruttare i campi carichi. In una teoria quantistica di gauge locale, gli stati carichi sono caratterizzati da una cruciale non località: l'algebra dei campi che usiamo per descrivere il sistema, che contiene anche i campi carichi oltre alle osservabili gauge-invarianti, non può essere simultaneamente locale e generare stati che hanno norma strettamente positiva. Ad esempio, nella QED: nella gauge di Coulomb l'algebra dei campi non è locale e tutti gli stati hanno norma positiva, mentre nella gauge di Gupta-Bleuer l'algebra dei campi è locale, ma esistono stati "non fisici" di norma negativa, i fotoni longitudinali. Per una discussione approfondita, nel contesto degli assiomi di Wightman, si veda [Strocchi g].

Consideriamo un sistema quantistico, senza campo elettromagnetico. Aggiungiamo il campo elettromagnetico, sulla falsariga dell'approccio classico, tramite accoppiamento minimale. Definiamo la dinamica attraverso le hamiltoniane locali, ottenute sostituendo nella densità di hamiltoniana della materia le derivate ordinarie con le derivate covarianti, e aggiungendo il termine cinetico del campo elettromagnetico libero. Lo spazio degli stati è l'opportuna estensione dello spazio degli stati della sola materia. Aggiungiamo all'algebra dei campi il potenziale vettore *A*: rimane il problema di stabilire le regole di commutazione dell'operatore campo elettromagnetico appena introdotto.

Per risolvere questo problema, possiamo quantizzare canonicamente una teoria classica di materia e campo elettromagnetico, in una gauge particolare: le relazioni di commutazione cercate si deducono dalla corrispondente struttura canonica classica. La quantizzazione canonica di un sistema vincolato si può discutere in termini delle parentesi di Dirac [Weinberg I]. Scegliamo il procedimento di quantizzazione canonica nella gauge di Coulomb, elencando solo alcuni dettagli essenziali e rimandando alla letteratura per una discussione più adeguata.

Sappiamo, per argomenti di carattere generale, che il campo elettromagnetico possiede due possibili stati di elicità per ogni impulso \vec{k} fissato. Il vincolo fondamentale della gauge di Coulomb è

 $\vec{\nabla}\cdot\vec{A}=0\quad.$

Questo vincolo è sempre realizzabile, almeno localmente. Nella gauge di Coulomb, la parte temporale del 4-potenziale, il potenziale scalare ψ , dipende solo dalla densità di carica della materia:

$$\psi(x) = \int d^3y \, \frac{\rho(y)}{|x-y|}$$

Il potenziale vettore \vec{A} , a impulso \vec{k} fissato, descrive un oggetto con tre gradi di libertà; la condizione $\vec{\nabla} \cdot \vec{A}(x) = 0$ elimina il cosiddetto fotone longitudinale. In questo modo il 4-potenziale *A* descrive un oggetto con soli due gradi di libertà, gli stati di elicità, per ogni impulso \vec{k} fissato.

Introduciamo gli operatori di creazione per i modi del campo elettromagnetico:

$$a^{*}(k,\lambda) \quad k \in \mathbb{R}^{3}, \, \lambda = 1,2 \quad ;$$
$$\left[a(\vec{k},\lambda), a(\vec{k}',\lambda')\right] = 0 \quad \left[a(\vec{k},\lambda), a^{*}(\vec{k}',\lambda')\right] = (2\pi)^{3}\delta^{3}(\vec{k}-\vec{k}')\delta_{\lambda\lambda'}\mathcal{I}$$

L'operatore $a^*(\vec{k}, \lambda)$ crea un fotone di impulso \vec{k} ed elicità λ . Lo spazio di Hilbert degli stati del campo elettromagnetico si ottiene applicando al vuoto le combinazioni lineari dei prodotti finiti degli operatori di creazione (costruzione di Fock). In questa costruzione, lo spazio di Hilbert contiene solo stati fisicamente realizzabili. La quantizzazione in gauge differenti, come ad esempio nella gauge covariante di Gupta-Bleuer, porta a introdurre operatori di creazione per stati non fisici, che hanno norma negativa.

Osserviamo che, dopo la quantizzazione, il campo ψ non contiene osservabili relative al campo elettromagnetico, ma solo campi di materia; il campo \vec{A} , a impulso \vec{k} fissato, possiede due gradi di libertà, le polarizzazioni relative alle due direzioni ortogonali a \vec{k} . Questa separazione dei gradi di libertà è una conseguenza dell'avere scelto la gauge di Coulomb, e cambia al cambiare della gauge.

Le relazioni di commutazione canoniche per la gauge di Coulomb sono, nello spazio delle coordinate [Weinberg I]:

$$[A_i(x), A_j(y)] = 0 \quad [\Pi_i(x), \Pi_j(y)] = 0 \quad ;$$

$$[A_i(x), \Pi_j(y)] = i\delta_{ij}\delta^3(x-y) + i\frac{\partial^2}{\partial x_j\partial x_i}\left(\frac{1}{4\pi|x-y|}\right) \quad ;$$

$$[\varphi_\alpha(x), A_j(y)] = 0 \quad [\varphi_\alpha(x), \Pi_i(y)] = [\varphi_\alpha(x), \frac{\partial}{\partial y_i}A_0(y)] \quad .$$

II è l'impulso coniugato di *A*. Riconosciamo in queste regole di commutazione la non località dei campi carichi φ_{α} , almeno rispetto al campo elettromagnetico. Quella descritta è una costruzione quantistica consistente per il campo elettromagnetico, anche se non l'unica possibile, ed è quella che utilizzeremo in questo lavoro. Se lo stato fondamentale del sistema è uno stato localmente Fock, uno stato fisicamente realizzabile differisce dallo stato fondamentale per l'aggiunta di un numero finito di fotoni. Esistono stati, contenenti "infiniti fotoni soffici", che non sono fisicamente realizzabili a partire dal vuoto, ovvero da quello stato annichilato da tutti gli operatori $a(\vec{k}, \lambda)$: sono un esempio gli stati coerenti (appendice B). A noi interesseranno in particolare quegli stati del campo elettromagnetico che sono la modificazione di uno stato coerente (campo classico di *background*) per un numero finito di eccitazioni (fluttuazioni quantistiche).

2.2 Sistemi di particelle cariche

Un sistema elettromagnetico esteso è un insieme di infinite particelle quantistiche cariche (con densità finita), non relativistiche, interagenti attraverso il campo elettromagnetico ed eventualmente attraverso qualche altra forma di interazione efficace, introdotta tramite un potenziale. Usiamo il formalismo della teoria dei campi (capitolo 1). D'ora in poi useremo una notazione più snella possibile, cercando di privilegiare gli aspetti fisicamente interessanti senza annegare nel formalismo; teniamo però presente che, se necessario, le scritture "formali" che adoperiamo possono essere senza difficoltà ricondotte a scritture matematicamente corrette, introducendo le necessarie regolarizzazioni. Supporremo ovunque di lavorare in unità $\hbar = c = 1$.

Ad ogni specie di particella corrisponde un campo quantistico φ_{α} : α è un indice che distingue le varie specie di particelle. A seconda dello spin della particella descritta, il campo φ possiede una certa struttura di indici spinoriali e di Lorentz, che di solito non espliciteremo. I campi di materia obbediscono alle regole di commutazione canoniche, se sono bosoni, o alle regole di anticommutazione canoniche, se sono fermioni:

$$\begin{split} [\varphi_{\alpha}(x),\varphi_{\beta}(y)]_{\pm} &= 0 \quad ; \\ [\varphi_{\alpha}(x),\varphi_{\beta}^{*}(y)]_{\pm} &= \delta_{\alpha\beta}\delta^{(4)}(x-y) \quad ; \end{split}$$

le parentesi $[\cdots]_{\pm}$ indicano l'anticommuatore per campi fermionici (segno +) oppure -i volte il commutatore per campi bosonici (segno

–). Se i campi non sono scalari, bisogna aggiungere le δ di Kronecker relative agli indici spinoriali e di Lorentz dei campi. Non occorre fare distinzione fra campi elementari, come il campo dell'elettrone, e campi di particelle composte, come i nuclei, purché questi ultimi si possano trattare come particelle stabili.

Il campo elettromagnetico ricopre un ruolo particolare, dunque per indicarlo usiamo una notazione particolare: sia *A* il potenziale del campo elettromagnetico. Indichiamo con *A* il 4-potenziale e con \vec{A} il potenziale vettore del campo magnetico: spesso, se è chiaro dal contesto che stiamo parlando del potenziale vettore, ometteremo il segno di vettore $\vec{-}$ per semplicità. *A* è un campo quantistico, che (nella gauge di Coulomb) soddisfa alle regole di commutazione canoniche discusse in 2.1.

Lavoreremo sempre, salvo se diversamente specificato, a temperatura T = 0: introdurre una temperatura (piccola) non nulla non altera la sostanza delle conclusioni cui arriveremo, e presenta solo una modesta complicazione delle formule dovuta all'introduzione della statistica.

L'algebra \mathfrak{A} delle variabili canoniche è quella generata dai campi φ_{α} e dal campo elettromagnetico A. Di questa algebra esiste una sottoalgebra di interesse, l'algebra delle osservabili \mathfrak{A}_{obs} , generata dai prodotti gauge-invarianti dei campi che costituiscono \mathfrak{A} . La simmetria di gauge è discussa nel paragrafo 2.1.

Osserviamo che può essere comodo lavorare con un'algebra che contenga anche campi non rigorosamente osservabili (non gaugeinvarianti) perché alcuni fenomeni, come la rottura spontanea della simmetria di fase, non sono visibili altrimenti; nonostante questo, sono comunque fenomeni molto rilevanti per discutere il sistema in considerazione.

L'algebra delle osservabili è rappresentata come algebra di operatori su un certo spazio di Hilbert, determinato dallo stato fondamentale del sistema Ω (costruzione GNS). Supponiamo che lo stato fondamentale sia localmente normale: i sistemi fisici che ci interessano possono avere infinite particelle, ma la densità di particelle dev'essere ovunque finita. Possiamo vedere lo spazio di Hilbert \mathcal{H} degli stati come il prodotto tensoriale degli spazi di Hilbert di materia e campo elettromagnetico, rispettivamente, almeno limitatamente a regioni spaziali finite:

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}^{part} \otimes \mathcal{H}^{e.m.}$$

Gli spazi di Hilbert di materia e di campo elettromagnetico sono sottospazi generati applicando al vuoto¹ gli operatori di creazione dei campi di materia e di campo elettromagnetico, rispettivamente. Questa suddivisione dello spazio degli stati non è necessariamente significativa per sisiemi interagenti; in questo caso le eccitazioni elementari possono non essere esattamente separabili in eccitazioni di "materia" e "campo elettromagnetico", ma sono in generale quasi-particelle o modi collettivi dati da una mescolanza di modi di materia e campo elettromagnetico. La suddivisione dello spazio di Hilbert che abbiamo proposto ci sarà utile nelle approssimazioni che studieremo nel seguito.

Supponiamo che lo stato fondamentale Ω del sistema esista e sia unico, e sia descritto da un certo raggio in \mathcal{H} . Il sistema che consideriamo è supposto invariante per traslazioni (spaziali e temporali), e queste simmetrie sono unitariamente implementate su \mathcal{H} ; non discutiamo il caso di sistemi invarianti per traslazioni discrete (cristalli), che dovrebbe presentare solo modeste complicazioni. Sia H l'operatore hamiltoniano che genera l'evoluzione temporale. L'hamiltoniana H si scrive come somma di vari addendi:

$$H = H_{part} + H_{e.m.} + H_{int}$$

Il termine $H_{part} = H_0 + V(\varphi)$ contiene l'energia cinetica dei campi di materia e un potenziale che descrive interazioni fra la materia diverse da quella elettromagnetica; assumiamo che V dipenda soltanto dai campi di materia, ma non dalle loro derivate. Il termine $H_{e.m.}$ contiene l'energia cinetica del campo elettromagnetico:

$$H_{e.m.} = \frac{1}{8\pi} \sum_{ij} \int d^3x \, \left(\dot{A}_i^2(x) + (\nabla_j A_i)^2(x) \right)$$

Il termine H_{int} contiene l'interazione del campo elettromagnetico con la materia: si ottiene come differenza dell'energia cinetica dei campi di materia, in cui le derivate normali sono sostituite con derivate covarianti, e dell'energia cinetica con le sole derivate normali, secondo la procedura standard dell'accoppiamento minimale. Se l'energia

¹per vuoto intendiamo quello stato annichilato dagli operatori di distruzione delle particelle libere.

cinetica dei campi di materia (non relativistici) si scrive

$$\frac{1}{2m}\int d^3x \, |\nabla\varphi(x)|^2$$

allora la corrispondente interazione con il campo elettromagnetico è

$$H_{int} = e \int d^3x \, j(x) \cdot A(x) + \frac{e^2}{2m} \int d^3x \, \rho(x) A(x)^2$$

con

$$j(x) = \frac{1}{2mi} \left(\nabla \varphi^*(x) \varphi(x) - \varphi^*(x) \nabla \varphi(x) \right) \quad ;$$
$$\rho(x) = \varphi^*(x) \varphi(x) \quad .$$

L'algebra delle osservabili, lo spazio degli stati e l'operatore hamiltoniano caratterizzano univocamente un sistema esteso di particelle cariche interagenti. Nel seguito studieremo in particolare le proprietà magnetiche di un sistema stazionario: classicamente, una situazione di campo elettrico nullo e campo magnetico indipendente dal tempo è descritta, nella gauge di Coulomb, da un potenziale scalare A_0 nullo e un potenziale vettore \vec{A} indipendente dal tempo.

2.3 Teoria classica e teoria quantistica

Abbiamo introdotto un quadro generale per descrivere un sistema infinitamente esteso, non relativistico, di particelle che interagiscono con il campo elettromagnetico, nell'ambito della meccanica quantistica. Come abbiamo già detto, questo è il modello microscopico "elementare" di un mezzo materiale. Si tratta di un modello straordinariamente complicato, e per estrarre delle informazioni fisiche significative bisogna per forza ricorrere a qualche tipo di approssimazione: perfino la questione della stabilità di un tale sistema è una questione assolutamente non banale.

A livello classico possiamo schematizzare un mezzo materiale semplicemente modificando le equazioni di Maxwell nel vuoto, introducendo le costanti dielettriche. Un obiettivo della fisica dello stato solido è ricavare queste costanti a partire da una descrizione microscopica del mezzo: per fare questo si introducono vari metodi di approssimazione, basati su modelli classici, semiclassici o quantistici. Facciamo un esempio: per semplicità, potremmo trattare quantisticamente le particelle e classicamente il campo elettromagnetico. In questo caso, l'equazione del moto per le particelle è l'equazione di Schroedinger, in campo esterno; le equazioni del moto per il campo elettromagnetico sono le equazioni di Maxwell, in cui le sorgenti sono gli operatori quantistici densità e corrente di particelle, mediati sullo stato del sistema.

Un problema tipico, che nasce spontaneamente per confrontare teoria ed esperimento, è lo studio di un sistema immerso in un campo elettrico o magnetico esterno, di cui osserva la risposta in termini di corrente o magnetizzazione. Naturalmente, dato che il campo elettromagnetico è un oggetto dinamico, all'interno del mezzo il campo esterno può essere amplificato, schermato o distorto; il problema si complica, visto che generalmente si assume che la corrente o la magnetizzazione del sistema sono la risposta al campo locale, non al campo elettromagnetico esterno; in linea di principio, i due campi sono diversi. Dunque è necessario risolvere in qualche modo il problema aggiuntivo della determinazione del campo locale, a partire dal campo esterno. Questo porta inevitabilmente all'introduzione di nuove approssimazioni.

In questo groviglio di approssimazioni, a cavallo fra teoria classica e teoria quantistica, è facile perdersi; occorre molta attenzione per tenere sotto controllo il quadro generale. Spesso si usa la stessa notazione per descrivere il campo elettromagnetico sia quando è considerato un campo quantistico, sia quando è considerato un campo classico; ancora, difficilmente, nell'elencare l'insieme dei modelli semiclassici o quantistici necessari a descrivere un fenomeno, si discutono i punti di contatto fra i diversi linguaggi, che sono necessari però per passare da un modello all'altro. Di solito si da per scontato che, nella situazione concreta, l'esperienza e/o l'intuizione del lettore siano sufficienti per risolvere le ambiguità. Nella nostra discussione della formula di Kubo cercheremo invece di discutere criticamente tutti questi passaggi, e vedremo che non sono sempre del tutto automatici.

In definitiva, la descrizione quantistica dei mezzi materiali presuppone di integrare diverse teorie parziali, classiche, semiclassiche o quantistiche, che discutono i vari aspetti del problema complessivo, alla luce delle approssimazioni seguite. Per evitare confusione è necessario puntualizzare a ogni passo il significato dei simboli che si utilizzano, e il modo in cui si relazionano le teorie parziali in cui abbiamo scomposto il problema complessivo. Le ambiguità possono dare origine a conclusioni paradossali o fuorvianti: per questo vogliamo adottare un atteggiamento il più possibile critico e attento (forse pedante, qualche volta) nella nostra discussione della superconduttività.
Parte II

Teorie della superconduttività

Capitolo 3

Caratterizzazione dei superconduttori

In questo capitolo parliamo di alcuni dei fenomeni fisici che caratterizzano universalmente i superconduttori, primo fra tutti l'effetto Meissner; richiamiamo la teoria fenomenologica di London della superconduttività, che fornisce un linguaggio (classico) per discutere l'effetto Meissner in termini matematici precisi. Infine, discutiamo la scelta di adottare l'effetto Meissner come criterio di superconduttività.

3.1 L'effetto Meissner

Consideriamo la risposta lineare di un mezzo materiale a un campo elettromagnetico, nel contesto di una teoria classica; il mezzo è caratterizzato da opportune costanti dielettriche e, più in generale, da opportune funzioni di risposta. Le varie proprietà ottiche del mezzo, come ad esempio la conducibilità, sono supposte note, e sono tradutte in proprietà specifiche delle costanti dielettriche. Alcune di esse possono essere dedotte più o meno accuratamente da modelli microscopici: in questo paragrafo trascuriamo questo aspetto della questione. Piuttosto, ci concentriamo su alcune conseguenze interessanti che possono essere dedotte dalla struttura delle funzioni di risposta che caratterizzano il mezzo, senza preoccuparci di come queste funzioni di risposta possano essere eventualmente ricavate. La teoria fenomenologica di London della superconduttività è una versione estremamente rudimentale di questo approccio.

Seguiamo da vicino il ragionamento descritto in [Jones]. Sia j^{ind} la densità di corrente che attraversa il mezzo, indotta nel sistema dal campo elettromagnetico descritto dal potenziale vettore A. Per semplicità, limitiamoci alla descrizione di soli campi magnetici, indipendenti dal tempo. Al primo ordine nel campo A, la corrente vale

$$j_{\alpha}^{ind}(x,t) = \int d^3x' \int dt' \,\theta(t-t') \,G_{\alpha\beta}(x,x';t,t') \,A_{\beta}(x',t') \quad ;$$

la funzione di risposta G è una funzione caratteristica del mezzo, e in questo paragrafo è supposta nota. Può essere calcolata a partire da una descrizione microscopica del mezzo, tramite la formula di Kubo. La funzione $\theta(t)$ che compare nella formula traduce matematicamente la richiesta fisica che il sistema sia causale. Inseriamo, se necessario per assicurare la convergenza degli integrali, una dipendenza dal tempo di A, con un fattore di switch-on adiabatico $e^{\eta t}$, $\eta \to 0^+$. Per semplicità, supponiamo che il mezzo materiale sia omogeneo e isotropo, invariante per traslazioni temporali; l'invarianza per traslazioni dice che G dipende solo dalle differenze x - x' e t - t', l'invarianza per rotazioni permette di affermare che G è proporzionale al tensore identità $\delta_{\alpha\beta}$. Possiamo passare in trasformata di Fourier, in cui la formula per j^{ind} assume la forma più semplice

$$j^{ind}(q,\omega) = G(q,\omega) \cdot A(q,\omega) \quad . \tag{3.1}$$

q, ω sono le variabili coniugate a x, t rispettivamente. Osserviamo che il campo magnetico $B(q) = iq \wedge A(q)$ è automaticamente ortogonale a q e a $j^{ind}(q)$.

Stabiliamo adesso la connessione fra G e l'effetto Meissner: se esiste finito e strettamente positivo il limite

$$\lim_{q\to 0}\lim_{\omega\to 0}G(q,\omega)$$

allora il sistema presenta effetto Meissner, ovvero "espelle" il campo magnetico. Nel seguito tradurremo queste parole in termini matematici precisi e dimostreremo questa affermazione.

Consideriamo un campo esterno statico A(q) ($\omega \rightarrow 0$), trasverso $(q \cdot A(q) = 0)$; il campo elettrico è nullo. Supponiamo che il campo magnetico sia generato da una corrente esterna j^{ext} (a divergenza nulla): fisicamente, pensiamo di descrivere un campione metallico

all'interno di un solenoide che genera campo magnetico tramite la corrente j^{ext} che lo attraversa. La reazione indotta dal campione sulla corrente j^{ext} è trascurabile. A sua volta il campo magnetico B induce una corrente j^{ind} , che induce altro campo magnetico, e cosi via, finché il sistema non raggiunge l'equilibrio. Le equazioni di Maxwell per il campo magnetico B sono

$$iq \cdot B(q) = 0$$
 $iq \wedge B(q) = 4\pi j^{tot}(q)$ (3.2)

ove $j^{tot} = j^{ext} + j^{ind}$; all'ordine più basso ci aspettiamo che la corrente j^{ind} generata dal campo magnetico sia lineare in *B*, almeno per piccoli campi. Facciamo questa approssimazione. La corrente totale è automaticamente a divergenza nulla, per la seconda delle 3.2; dunque anche la corrente indotta è a divergenza nulla, cioè perpendicolare a *q*.

Ricordiamo che q, $j^{ind}(q)$ e B(q) sono ortogonali. Scriviamo

$$j^{ind}(q) = -\frac{K(q)}{4\pi} \frac{iq \wedge B(q)}{q^2}$$
(3.3)

che definisce K(q). Sostituita questa espressione nelle equazioni 3.2, risulta

$$iq \wedge B(q) \left[1 + \frac{K(q)}{q^2} \right] = 4\pi j^{ext}(q)$$

che si può risolvere per *B*, prendendo il rotore di ambo i membri:

$$iq \wedge [iq \wedge B(q)](1 + \frac{K(q)}{q^2})$$
$$= (q^2 + K(q))B(q) = 4\pi iq \wedge j^{ext}(q)$$

e infine

$$B(q) = 4\pi \frac{iq \wedge j^{ext}(q)}{q^2 + K(q)}$$

La corrente j^{ext} è localizzata in una certa regione di spazio. Se K è un numero positivo non nullo nel limite $q \to 0$, il campo B in funzione delle coordinate x risulta esponenzialmente depresso per $|x| \to \infty$, o più precisamente per x lontane dal supporto di j^{ext} : diciamo che il sistema scherma il campo magnetico, ovvero esibisce effetto Meissner. Se invece nel limite di interesse K va a 0, il campo magnetico non è esponenzialmente tagliato, e non c'è effetto Meissner.

Se ora consideriamo il rotore dell'equazione 3.3, facilmente otteniamo

$$iq \wedge j^{ind}(q) = -\frac{K(q)}{4\pi}B(q) = -\frac{K(q)}{4\pi}iq \wedge A(q)$$

e dalla formula 3.1 otteniamo che la parte trasversa di $G(q, \omega \to 0)$ è proprio K(q), a meno di un fattore 4π , e concludiamo: c'è effetto Meissner se (e solo se) la parte trasversa della funzione di risposta G, nel limite di cui sopra, è diversa da 0. Possiamo legittimamente affermare che, nei limiti di validità della approssimazione di risposta lineare, questo è un criterio efficace per dire se un mezzo materiale sia superconduttore o meno: basta calcolare il limite indicato della G, che è una grandezza intrinseca di un sistema fisico assegnato, dipendente solo dal suo stato fondamentale e dalla sua hamiltoniana.

Attenzione: l'ordine con cui si fanno i limiti su G è rilevante. Infatti, stiamo studiando una proprietà statica di un sistema esteso, dunque tutte le quantità di interesse devono variare lentamente nel tempo ($\omega \to 0$). Lentamente significa che il tempo di variazione $\tau \sim \omega^{-1}$ deve essere grande rispetto a un tempo caratteristico del sistema, dato da $\sim v \cdot L$, con v velocità di propagazione nel mezzo (diciamo al più $\sim c = 1$ per tipici fenomeni elettromagnetici) e Ldimensione macroscopica del sistema. In formule

$$\tau \sim \omega^{-1} \gg v \cdot L$$

Ci interessa il limite di campi che variano lentamente nello spazio, ovvero $k \rightarrow 0$: dobbiamo scegliere valori di k dell'ordine di 1/L. Per studiare fenomeni statici a k piccoli deve valere la relazione

$$\omega \ll v^{-1} \cdot L^{-1} \sim v^{-1} \cdot k \quad .$$

Dunque per studiare caratteristiche fisiche statiche è necessario fare il limite per $\omega \to 0$ prima del limite per $k \to 0$. L'ordine inverso descrive una situazione fisica del tutto differente: un campo uniforme che oscilla lentamente nel tempo, contro un campo statico lentamente variabile nello spazio. In generale questi due limiti non commutano.

3.2 La teoria fenomenologica di London

L'effetto Meissner, dopo la infinita conducibilità, è forse la caratteristica più nota e sorprendente dei superconduttori, e sta alla base di molte applicazioni. In questo paragrafo discutiamo in dettaglio la teoria fenomenologica di London, che descrive l'effetto Meissner nei solidi.

Il modello di London è un modello fenomenologico classico, che riproduce essenzialmente solo l'infinita conducibilità e l'effetto Meissner. A partire dai modelli quantistici cosiddetti "microscopici", come la teoria di Landau-Ginzburg e il modello BCS, possiamo ricostruire le equazioni costitutive di London in termini di opportuni parametri fenomenologici [Fetter], [Mahan]. Diverso, almeno in apparenza, è l'approccio di Weinberg, in cui l'effetto Meissner è una conseguenza del meccanismo di Higgs [Weinberg II]. Lo studio della superconduttività attraverso la formula di Kubo, a cui è dedicato questo lavoro, consiste in una derivazione quanto-meccanica delle formule fenomenologiche di London, e dunque dell'effetto Meissner, a partire da un modello microscopico elementare.

Consideriamo un mezzo materiale classico, non magnetico, caratterizzato dalle costanti dielettriche che compaiono nelle equazioni di Maxwell nella materia. Dato che il mezzo è non magnetico, non c'è differenza fra i campi B ed H. Sia j la supercorrente (stazionaria) che attraversa il superconduttore. Per l'equazione di continuità

$$\nabla \cdot j = 0$$

Per *j* vale un'equazione costitutiva, che è l'ingrediente fondamentale della teoria di London, analoga alla formula $j = \sigma E$ per i conduttori:

$$\nabla \wedge j = -n_s \frac{e^2}{m} B$$

in cui n_s è la densità dei superelettroni, ovvero delle particelle che trasportano la supercorrente, ed è un parametro aggiustabile della teoria. Ci si può convincere della ragionevolezza di questa formula, e verificarne la consistenza, combinando opportunamente le equazioni di Maxwell e la formula della forza di Lorentz (vedi ad esempio [Fetter]). Notiamo che, se A è il potenziale vettore del campo magnetico,

$$B = \nabla \wedge A \quad ;$$

se sostituiamo questa formula nell'equazione precedente otteniamo

$$abla \wedge j = -n_s rac{e^2}{m}
abla \wedge A$$

Nella gauge opportuna, la cosiddetta gauge di London per il campo magnetico

 $\nabla \cdot A = 0 \qquad A \cdot \hat{n} = 0 \quad \text{ai bordi del s.c.}$

le equazioni per la divergenza e il rotore di j sono automaticamente soddisfatte se poniamo

$$j = -n_s \frac{e^2}{m} A \quad ; \tag{3.4}$$

dunque il campo vettoriale j è determinato, a meno di una costante additiva irrilevante (aggiustabile con opportune condizioni al bordo), dal potenziale vettore A, nella gauge di London, che peraltro differisce dalla gauge di Coulomb solo nella specificazione dell'andamento di A sui bordi del superconduttore. L'equazione 3.4 è la forma più nota in cui scrivono le equazioni di London. Notiamo come il coefficiente fenomenologico n_s non sia altro che una versione estremamente semplificata della funzione di risposta definita nella formula 3.1; in particolare, n_s è legato al limite statico della funzione di risposta, e può essere sfruttato per dare un significato fisico a questo oggetto. n_s può essere positivo (superconduttività) o nullo (caso normale). La discussione del paragrafo 3.2 permette già di concludere che le equazioni di London descrivono un mezzo materiale superconduttore che presenta effetto Meissner; convinciamoci di questo fatto con un argomento alternativo, molto semplice. Sostituiamo la 3.4 nella equazione

$$\nabla \wedge B = 4\pi j$$

valida per il potenziale vettore di un campo magnetico statico, in assenza di campo elettrico:

$$\nabla \wedge B = \nabla \wedge \nabla \wedge A = \nabla (\nabla \cdot A) - \Delta A = 4\pi j$$

da cui

$$\Delta A = 4\pi n_s \frac{e^2}{m} A$$

Supponiamo di avere un superconduttore infinitamente esteso nel semipiano z < 0, e che il semipiano z > 0 sia vuoto; per z < 0, l'equazione precedente ammette la soluzione esponenzialmente depressa

$$A = A_0 e^{\lambda z}$$

in cui

$$\lambda^2 = 4\pi n_s e^2/m$$

Questa soluzione si raccorda con continuità alla soluzione per A linearmente crescente nel semipiano z > 0, corrispondente a un campo magnetico uniforme e costante. Prendendo il rotore di A, otteniamo un campo magnetico B esponenzialmente depresso per $z \to -\infty$, con una lunghezza di attenuazione tipica λ^{-1} (lunghezza di penetrazione). Il campo magnetico uniforme in z > 0 è schermato, ovvero c'è effetto Meissner; notiamo come la lunghezza di penetrazione dipenda dal parametro fenomenologico n_s .

3.3 Criteri di superconduttività

Da un punto di vista sperimentale, i superconduttori sono dei materiali che, in condizioni di bassa temperatura, presentano un insieme di caratteristiche estremamente peculiari, che rendono il loro riconoscimento abbastanza semplice e naturale.

Il fenomeno scoperto per primo è naturalmente il brusco annullarsi della resistività al di sotto della temperatura critica, da cui il termine "super" conduttore. Tuttavia, sono gli effetti magnetici le caratteristiche più peculiari e stravaganti dei superconduttori: il perfetto diamagnetismo o effetto Meissner, da cui seguono la quantizzazione del flusso magnetico e le correnti persistenti [Fetter]. Altri aspetti fenomenologici, come il gap (ovvero l'andamento esponenziale dei calori specifici a basse temperature) sono caratteristici soltanto di alcune classi di superconduttori [La02]. È una questione aperta, invece, se un altro elemento distintivo dei superconduttori, l'effetto Josephson, sia anch'esso una conseguenza dell'effetto Meissner: esistono argomenti convincenti per supporre che l'effetto Josephson sia la conseguenza della rottura spontanea di una simmetria ([Weinberg II], [Gr05]), e almeno nel caso relativistico l'effetto Meissner implica la presenza di un modo di Goldstone (vedi paragrafo 6.6), che potrebbe essere ragionevolmente originato dalla rottura spontanea di una simmetria. Speriamo che all'interno del quadro concettuale che proponiamo in questo lavoro si possa dare una risposta precisa a questa domanda.

Vale la pena di notare che, fra le proprietà ottiche dei supeconduttori, le proprietà magnetiche sono decisamente quelle più particolari e caratterizzanti; la infinita conducibilità è invece una proprietà che (per estrapolazione) avrebbero tutti i normali conduttori a temperatura 0. In effetti, quello che inizialmente destò sorpresa nello studio dei superconduttori non fu tanto l'annullarsi della resistività con l'annullarsi della temperatura, quanto l'andamento di questa curva, che cambia bruscamente in corrispondenza di una certa temperatura critica T_c . A questo proposito, dimostreremo che il gas di Fermi libero, infinitamente conduttore a temperatura 0, non presenta l'effetto Meissner: un esempio un po' accademico di un mezzo infinitamente conduttore che non è un "vero" superconduttore. Per essere concreti, nel seguito discuteremo la superconduttività in termini dell'effetto Meissner; abbiamo analizzato l'effetto Meissner, nell'approssimazione di risposta lineare al campo magnetico, al paragrafo 3.1. La teoria di London non è altro che un caso particolare, semplificato al massimo, di questa risposta lineare in un contesto classico. La formula di Kubo non è altro che la più semplice generalizzazione quantistica della risposta lineare a un campo magnetico. In definitiva, scegliamo di discutere la superconduttività, limitatamente all'effetto Meissner, che è un aspetto decisamente saliente di quest'ultima; per discutere l'effetto Meissner in ambito quantistico, usiamo la formula di Kubo. Osserviamo che questo approccio alla superconduttività, oltre che essere essenziale e anche piuttosto intuitivo, è anche e soprattutto model independent. Naturalmente, dovremo cercare di capire se l'utilizzo della formula di Kubo sia un procedimento sensato per affrontare il problema: sulla consistenza e la solidità di questo approccio, discuteremo diffusamente nel capitolo 9.

La scelta di adottare l'effetto Meissner come criterio di superconduttività nasce dal fatto che questo criterio:

- ammette una descrizione matematica semplice e flessibile;
- ammette una interpretazione fisica diretta, visto che è formulato in termini esclusivamente classici;
- è una proprietà fortemente caratterizzante;
- è semplicemente riconoscibile.

Naturalmente, discutere la superconduttività esclusivamente in termini dell'effetto Meissner può essere riduttivo: non è chiaro, per esempio, se un mezzo materiale che esibisce effetto Meissner presenti anche effetto Josephson oppure no. Si tratta, come abbiamo già osservato, di un problema aperto, su cui speriamo di poter gettare un po' di luce. Sarà interessante, a questo proposito, confrontare l'approccio basato sulla risposta lineare con un approccio in apparenza molto diverso, quello di Weinberg, basato sulla rottura spontanea di simmetria. Notiamo infine come entrambi questi approcci non dipendano in modo rilevante dalla presenza o assenza nello spettro di particelle del cosiddetto *gap*, su cui essenzialmente si basa il modello BCS. In effetti, l'osservazione di superconduttori *gapless* [La02] dimostra che, a differenza dell'effetto Meissner e dell'effetto Josephson, il *gap* non è una caratteristica decisiva dei sistemi superconduttori.

Capitolo 4

Teorie della superconduttività

La superconduttività è un fenomeno sperimentale molto particolare. Una grande quantità di materiali, a basse temperature, esibisce un insieme di proprietà elettromagnetiche e termodinamiche del tutto peculiari, come ad esempio: infinita condicibilità, effetto Meissner, andamento esponenziale dei calori specifici, effetto Josephson; ci si chiede se esiste una spiegazione, qualitativa e quantitativa, di questi fenomeni. Esistono vari modi di rispondere a questa domanda, che poi corrispondono a diverse strategie nell'affrontare il problema della superconduttività. In questo capitolo esaminiamo alcune di queste strategie, per meglio apprezzare le caratteristiche della strategia particolare che adottiamo in questo lavoro e i risultati che permette di ottenere.

4.1 Alcuni modelli teorici

Le teorie della superconduttività si distinguono innanzitutto per il livello di generalità con cui affrontano il problema. Naturalmente, una maggiore generalità va di pari passo con una maggiore difficoltà nel confronto quantitativo con i dati sperimentali: calcoli accurati necessitano di approssimazioni numerose e azzeccate per essere portati fino in fondo. Mentre la fisica teorica è interessata alla ricerca di meccanismi generali che rendano conto, almeno qualitativamente, della fenomenologia, nella fisica dello stato solido è importante riuscire a costruire modelli efficaci e dettagliati che permettano un confronto quantitativo con l'esperimento. Nel primo caso, abbiamo a disposizione un modello estremamente generale (ed estremamente complicato) di mezzo materiale, un sistema di particelle cariche e campo elettromagnetico, caratterizzato da una hamiltoniana e uno stato fondamentale (spesso indeterminato). Cerchiamo qualche condizione particolarmente significativa sull'uno o sull'altra che permetta di classificare il mezzo come normale oppure superconduttore. Nel secondo caso, abbiamo a disposizione un modello particolare, il più possibile semplificato, che cerca di schematizzare solo le caratteristiche rilevanti del fenomeno in questione. Il mezzo x è descritto da una hamiltoniana efficace, che contiene qualche parametro aggiustabile caratteristico di x, e utilizziamo questa hamiltoniana per prevedere teoricamente i valori delle grandezze osservabili che ci interessa studiare, come ad esempio le costanti dielettriche di x.

Le strategie proposte sono due modi possibili, profondamente diversi, per affrontare la questione della superconduttività. Di seguito, commentiamo alcune tra le più interessanti presenti in letteratura.

La rottura spontanea della simmetria di gauge locale

Discutiamo alcuni aspetti dell'interpretazione della superconduttività data da S. Weinberg, in termini di rottura spontanea di simmetria e meccanismo di Higgs [Weinberg II]. Si tratta di una strategia squisitamente teorica: un mezzo materiale è descritto microscopicamente da un sistema accoppiato di particelle cariche e campo elettromagnetico. I mezzi superconduttori sono classificati nel modo seguente: un mezzo materiale è superconduttore se la simmetria di gauge locale U(1) del campo elettromagnetico è rotta spontaneamente. Infatti, nei superconduttori 'tipo BCS' abbiamo il parametro d'ordine

$$\langle \psi \psi \rangle_0 \neq 0$$
 ;

 ψ è il campo carico dell'elettrone. Il meccanismo di Higgs fa si che il campo elettromagnetico "acquisti massa": inoltre, il sistema è descritto da una lagrangiana effettiva sulla cui struttura esistono dei vincoli molto stringenti, in conseguenza della rottura spontanea della simmetria di gauge. L'effetto Meissner è essenzialmente una conseguenza della generazione di massa del fotone [Coleman]: il propagatore del fotone nello spazio degli impulsi vale

$$\frac{g_{\mu\nu}}{k^2 - m^2}$$

che da luogo, nello spazio delle coordinate, a un campo statico depresso esponezialmente, con lunghezza di attenuazione ~ m^{-1} , piuttosto che a un campo depresso come 1/r. La rottura della simmetria U(1) fa si che lo stato fondamentale di un superconduttore sia caratterizzato da una fase φ : se mettiamo in contatto due superconduttori, la differenza di fase $\Delta \varphi$ fra i due genera meccanismi di interferenza, che sono alla base della discussione dell'effetto Josephson [Weinberg II].

Il modello BCS

Il modello BCS è un modello microscopico estremamente semplice e allo stesso tempo molto efficace nel descrivere di una vasta classe di superconduttori, per il notevole accordo numerico fra le predizioni teoriche e i risultati sperimentali. Il modello BCS schematizza la condensazione degli elettroni di un mezzo materiale in un canale anomalo, quello delle coppie di Cooper: in un superconduttore convenzionale,

$$\langle \psi(k\uparrow)\psi(-k\downarrow)\rangle_{BCS} \neq 0$$

 ψ è il campo dell'elettrone. Abbiamo una densità non nulla di stati legati elettrone-elettrone, con impulso totale nullo, in singoletto di spin (coppie di Cooper). Un superconduttore BCS è una specie di condensato di coppie di Cooper, che si discute in un'approssimazione simile all'Hartree-Fock [Mahan] [Fetter] [Giuliani].

Le eccitazioni elementari del modello BCS sono descritte da un campo Ψ diverso dal campo dell'elettrone (vedi capitolo 8):

$$\psi(k) = u(k)\Psi(k) + v(k)\Psi^*(-k) \quad ;$$

il vuoto BCS $|BCS\rangle$ è caratterizzato da

$$\Psi(k) \left| BCS \right\rangle = 0$$

Lo spettro delle eccitazioni del modello BCS presenta un *gap* caratteristico, dell'ordine di $10^{-8} eV$, che è stato osservato in molti superconduttori a bassa temperatura (ma si veda anche [La02]). L'analisi BCS della superconduttività si basa sulla discussione delle conseguenze di questo *gap*, in termini di proprietà ottiche e termodinamiche (si veda ad esempio [Fetter]).

Alcuni sviluppi recenti

Con la scoperta di nuovi materiali superconduttori, il panorama delle interpretazioni teoriche della superconduttività si è allargato. Nella fisica dello stato solido si cercano continuamente nuove soluzioni, concettuali e tecniche, per raggiungere il controllo delle nuove specie di superconduttori ad alta temperatura. Vedremo qualche esempio, più che altro per mostrare come ancora gli sforzi per risolvere il problema della superconduttività non siano confluiti in una soluzione completa e condivisa. Riprenderemo la teoria di Weinberg, insieme con uno scenario analogo ma alternativo, in un paragrafo distinto e in maniera un poco più approfondita: questo perché nel paragrafo 6.6 presenteremo un risultato che si confronta in modo interessante con l'analisi di Weinberg.

La BCS non sembra essere una teoria efficace al di fuori dell'approssimazione di *weak coupling regime*, ovvero di elettroni debolmente interagenti con i fononi del reticolo [Fetter]. Certe specie di superconduttori ad alta temperatura sono caratterizzate da una interazione fra fononi ed elettroni confrontabile, per intensità, con la repulsione coulombiana fra gli elettroni stessi: questi sistemi non sono descritti efficacemente dalla teoria BCS convenzionale (si veda già l'estensione di Eliashberg della BCS, [Fetter] [Jones]).

La ricerca nel campo dei nuovi superconduttori è molto attiva. I sistemi superconduttori ad alta temperatura, come i cuprati [Al05] hanno di solito una struttura cristallina molto elaborata, con notevoli quantità di impurezze; sono stati proposti molti e vari meccanismi microscopici per cercare di estrarre da questa struttura complicata la fisica rilevante per le proprietà dei superconduttori. Ad esempio, nell'articolo citato [Al05], si propone la formazione di un condensato BCS di coppie polarone-polarone, piuttosto che elettrone-elettrone. Oltre a cercare di estendere il BCS, si tentano anche strade alternative: in [Lu05], si tenta di calcolare le quantità osservabili caratteristiche dei superconduttori, come la temperatura critica T_c , con la Density Functional Theory (DFT), trattando perturbativamente sia l'interazione coulombiana che l'interazione mediata dai fononi; purtroppo, le difficoltà tecniche restano notevolissime, nonostante la potenza della DFT.

Gli esempi riportati mostrano che, nel problema aperto della superconduttività, non è neppure chiaro se gli sviluppi possano nascere da una estensione del BCS, o si debba andare oltre. Questo aiuta a capire l'importanza di un approccio alla superconduttività, come quello discusso in questo lavoro, che non assuma meccanismi particolari, ovvero che sia *model independent*.

Il nostro approccio alla superconduttività

In questo lavoro discutiamo la superconduttività da un punto di vista molto generale. Consideriamo un mezzo materiale che consiste in un sistema (quantistico, non relativistico) di particelle cariche e campo elettromagnetico. Perturbiamo questo sistema con una corrente esterna j^{ext} , e studiamo la risposta (lineare) del sistema al campo generato da j^{ext} . Nel capitolo 5 facciamo vedere che, al-l'interno di un certo schema di approssimazione (la "analisi Kubo", paragrafo 5.3), il campo totale A all'interno del mezzo soddisfa

$$-k^{2}A(k) = 4\pi j^{ext} + G(k)A(k) \quad .$$
(4.1)

Questo campo è esponenzialmente depresso allontanandosi dalla sorgente j^{ext} , ovvero il sistema presenta effetto Meissner (è superconduttore!), se $G(k \rightarrow 0) > 0$, come discusso al capitolo 3. La quantità *G* dipende dalle proprietà della sola materia che compone il sistema (formula 6.1). Il nostro lavoro è dedicato alla discussione della fondatezza dell'analisi Kubo (capitolo 9) e alla discussione delle proprietà generali di *G* (capitolo 6), anche in relazione con l'analisi di Weinberg.

Una caratteristica fondamentale del nostro approccio è che prescinde assolutamente dal particolare tipo di meccanismo che origina la superconduttività, o che nella fattispecie determina la forma di G. Il quadro proposto è sufficientemente generale per cercare di discutere al suo interno il ruolo dei vari meccanismi particolari (*gap*, rottura di simmetria) nella generazione della superconduttività: si vedano le sezioni 6.6, 8.2. Infine, il procedimento di Kubo permette, in linea di principio, di calcolare la funzione di risposta G del mezzo materiale a partire dalla sua descrizione microscopica (paragrafo 5.2).

4.2 Il problema della simmetria di gauge locale

Discutiamo un poco più diffusamente il ruolo della rottura di simmetria in superconduttività. Vedremo infatti che questo modo di intendere la superconduttività è più vicino all'analisi Kubo di quanto possa sembrare in un primo momento: nel paragrafo 6.6 facciamo vedere che, per sistemi di particelle relativistici, la superconduttività, nel senso di Kubo, è equivalente alla presenza nello spettro della sola materia di un modo di Goldstone, cioè un'eccitazione (stabile) a massa nulla. Come argomentato al paragrafo 1.4, spesso la presenza di questi modi può essere ricondotta alla rottura spontanea di qualche simmetria, via teorema di Goldstone. Inoltre, nella discussione di sistemi non relativistici, il coefficiente di Kubo gioca un ruolo analogo a quello di una "massa efficace" del fotone (equazione 4.1). Nei superconduttori sembra agire qualche meccanismo di generazione di massa, che entra nella discussione Kubo attraverso il coefficiente G, e che Weinberg introduce all'inizio della sua analisi con la rottura spontanea di gauge, in analogia al meccanismo di Higgs.

Per i motivi discussi sopra, l'analisi Kubo della superconduttività porta naturalmente a chiedersi se questa sia generata dalla rottura spontanea di qualche simmetria. La discussione degli effetti di bordo e delle correlazioni a lungo raggio in superconduttività, al paragrafo 6.3, motiva ulteriormente l'interesse per questa domanda (per una discussione sulle relazioni fra effetti di bordo e rottura di simmetria si veda ad esempio [Strocchi b]). Nel seguito del paragrafo confrontiamo sommariamente due proposte distinte per spiegare la superconduttività in termini di rottura di simmetria:

- l'analisi di S. Weinberg, che propone la rottura spontanea della simmetria di gauge locale U(1) del campo elettromagnetico [Weinberg II];
- l'analisi di M. Greiter, che propone la rottura spontanea della simmetria globale U(1) di rotazioni di fase [Gr05].

Vediamo le caratteristiche comuni ai due modelli. In entrambi i casi, la rottura spontanea motiva la scelta di discutere il sistema in termini di un campo reale φ , il "modo di Goldstone", che non è altro che la fase del campo ψ che descrive gli elettroni del sistema:

$$\psi(x) = \rho(x)e^{i\varphi(x)}$$

La lagrangiana effettiva del sistema è fatta dipendere dal campo φ , le sue derivate $\partial_{\mu}\varphi$ e dal 4-potenziale A_{μ} del campo elettromagnetico. La gauge-invarianza pone dei vincoli decisivi sulla struttura possibile di questa lagrangiana efficace [Weinberg II] [Gr05]:

$$L = L(\varphi, \partial_{\mu}\varphi - A_{\mu}) + L_0^{e.m.}$$

La lagrangiana efficace di un superconduttore, pur non essendo nota nel dettaglio, dipende certamente da A_{μ} e dalle derivate di φ solo nella combinazione

$$\partial_{\mu}\varphi - A_{\mu}$$

Ora, in assenza di campo elettromagnetico ($A_{\mu} = 0$) ci aspettiamo che la fase degli elettroni sia costante, ovvero $\partial_{\mu}\varphi = 0$: la simmetria di gauge, che per i campi di materia è una rotazione di fase, è spontaneamente rotta. L'azione è stazionaria nel punto $\partial_{\mu}\varphi = 0$; ma allora, in presenza di campo elettromagnetico, l'azione è necessariamente stazionaria lungo la soluzione

$$\partial_{\mu}\varphi - A_{\mu} = 0$$

Questo comporta che all'interno di un superconduttore, dove gli effetti di bordo non sono importanti, il campo elettromagnetico è una pura gauge, ovvero si ha effetto Meissner. Dall'effetto Meissner seguono una quantità di altri fenomeni caratteristici dei superconduttori, come le correnti persistenti e la quantizzazione del flusso magnetico [Fetter]. L'effetto Josephson nasce invece dal fatto che lo stato fondamentale di un superconduttore, se il sistema si trova in una fase pura, è caratterizzato da un certo valore della fase dei campi di materia, a seguito della rottura spontanea della simmetria di fase, locale o globale che sia. Fra due superconduttori a contatto si sviluppano fenomeni di interferenza, dovuti alla differenza di fase fra i due: l'effetto Josephson è interpretato come un effetto di questa interferenza [Weinberg II].

Come possiamo notare dalla nostra presentazione sommaria, le notevoli analogie formali fra la rottura di una fase locale e di una fase globale fanno si che la discussione della fenomenologia sia essenzialmente la stessa per entrambi gli approcci. La differenza essenziale fra i due sta nell'interpretazione della "generazione di massa" del campo A: mentre Weinberg suggerisce che si tratta di un meccanismo analogo a quello di Higgs, che agisce nella (sua) teoria delle interazioni elettrodeboli, Greiter rifiuta di considerare il campo massivo A come un bosone di gauge, ma preferisce interpretarlo come un modo collettivo di Goldstone che acquista massa similmente a come accade per le oscillazioni di plasma [MS86]. Le principali obiezioni all'analisi di Weinberg che troviamo in [Gr05] sono sull'opportunità stessa di rompere una simmetria di gauge locale: infatti, la rottura spontanea di una simmetria locale è un concetto delicato, la cui interpretazione fisica è molto meno diretta rispetto alle più familiari rotture di simmetrie globali (si veda in proposito [Strocchi g]). Un aspetto suggestivo della discussione [Gr05] è il parallelismo stabilito fra la superconduttività dei sistemi di particelle cariche e la superfluidità dei sistemi di particelle neutre, uno spunto interessante che manca in [Weinberg II].

In conclusione, la discussione della superconduttività in termini di rottura di simmetria, anche prescindendo da quale sia esattamente la simmetria rotta, permette di cogliere molti aspetti essenziali di questo fenomeno. L'analisi del paragrafo 6.6 sembra motivare ulteriormente questa interpretazione, e nell'ambito dell'analisi generale che proponiamo potrebbe addirittura essere possibile arrivare a una conclusione generale sulla necessità della rottura di simmetria per la superconduttività. Per inciso, vedremo come il *gap* dello spettro di materia abbia poco a che fare con questa discussione.

Parte III

La formula di Kubo

Capitolo 5

Derivazione della formula di Kubo

In questo capitolo discutiamo la formula di Kubo e il criterio di superconduttività che se segue, attraverso quella che chiameremo "analisi di Kubo" o "analisi Kubo". La formula di Kubo permette di calcolare, in regime di risposta lineare, la corrente che attraversa un mezzo in funzione di A, il potenziale vettore del campo elettromagnetico all'interno del mezzo. L'effetto Meissner è la chiave per collegare il coefficiente di Kubo G e la superconduttività: in particolare G = 0 (G > 0) corrisponde ad assenza (presenza) di effetto Meissner, ovvero di superconduttività. La quantità G dipende solo dalle proprietà del sistema di materia in assenza di campo elettromagnetico.

Il criterio proposto è assolutamente generale, e prescinde dal particolare tipo di meccanismo microscopico all'origine della superconduttività.

5.1 Teoria della risposta lineare

Consideriamo un sistema di particelle quantistiche, in una particolare rappresentazione su uno spazio di Hilbert \mathcal{H} ; l'evoluzione temporale è generata dall'operatore hamiltoniano H. Assumiamo che H sia indipendente dal tempo. Sia ψ_0 lo stato fondamentale del sistema; lavoriamo per ora nello schema di Schroedinger. Scegliamo unità $\hbar = c = 1$. L'equazione di Schroedinger per l'evoluzione temporale di ψ_0 è

$$i\partial_t \psi_0\left(t\right) = H\psi_0\left(t\right)$$

la cui soluzione si può scrivere, formalmente,

$$\psi_0(t) = e^{-iHt}\psi_0(t=0)$$

Supponiamo di perturbare l'evoluzione del sistema introducendo una hamiltoniana di interazione $H^{ext}(t)$; sia ψ lo stato fondamentale della nuova hamiltoniana. L'equazione di Schroedinger per l'evoluzione temporale di ψ è

$$i\partial_t \psi(t) = (H + H^{ext}(t)) \psi(t)$$

di cui possiamo dare ancora una soluzione formale, facendo uso dell'esponenziale T-ordinato di $H + H^{ext}$: per definizione,

$$\psi(t) = T - \exp\left(-i\int_{t_0}^t dt' (H + H^{ext}(t'))dt'\right) \ \psi(t_0) \equiv U(t, t_0)\psi(t_0)$$

Se l'hamiltoniana non dipende dal tempo, l'esponenziale *T*-ordinato si riduce al normale esponenziale. Convenzionalmente, si assume che l'interazione contenga un fattore di switch-on adiabatico, e che gli stati $\psi \in \psi_0$ coincidono al tempo $t = -\infty$; questo ci permette di scrivere ψ in funzione di ψ_0 a tempi qualsiasi, usando gli *U*. In particolare, possiamo trasformare le aspettazioni su ψ in aspettazioni su ψ_0 .

Nel seguito, considereremo l'approssimazione dell'esponenziale Tordinato U al primo ordine nella hamiltoniana esterna H^{ext} . Normalmente, H^{ext} è moltiplicata per un parametro g, la costante di accoppiamento, che è piccolo rispetto a 1; in questo caso, il "primo ordine" nella hamiltoniana esterna è il primo ordine dell'espansione di U in serie di potenze del parametro g.

Con qualche passaggio (che non riportiamo; si veda ad esempio [Fetter]) si dimostra che l'aspettazione, in schema di Scroedinger,

$$\langle \psi^S(t) | \mathcal{O}_S(t) | \psi^S(t) \rangle$$

è uguale all'aspettazione, in schema di Heisenberg, di

$$\langle \psi_0^H | \Omega^{-1}(t) \mathcal{O}_H(t) \Omega(t) | \psi_0^H \rangle$$
;

l'operatore Ω vale

$$\Omega(t) = T - \exp\left(-i \int_{-\infty}^{t} dt' H_{H}^{ext}(t')\right)$$

È importante osservare che $\mathcal{O}_H(t)$ è calcolato nello schema di Heisenberg del sistema imperturbato, così come l' H^{ext} che compare in Ω : in particolare,

$$\mathcal{O}_H(t) = e^{iH(t-t_0)} \mathcal{O}_S(t) e^{-iH(t-t_0)}$$

il tempo t_0 è il tempo di riferimento per cui $\psi_0^S(t_0) = \psi_0^H$.

Abbiamo trasformato l'aspettazione dell'operatore $\mathcal{O}_S(t)$ su $\psi^S(t)$ in una aspettazione su ψ_0^H , che è funzione della costante di accoppiamento g tramite Ω . Al primo ordine in H^{ext} (cioè in g), questa formula diventa

$$\langle \psi^{S}(t) | \mathcal{O}_{S}(t) | \psi^{S}(t) \rangle = \langle \psi_{0} | \mathcal{O}_{H}(t) | \psi_{0} \rangle$$
$$+ \int_{-\infty}^{t} dt' \langle \psi_{0} | i [H_{H}^{ext}(t'), \mathcal{O}_{H}(t)] | \psi_{0} \rangle + \dots$$
(5.1)

 ψ_0 è lo stato fondamentale del sistema imperturbato, nello schema di Heisenberg. A titolo di esempio, vediamo come si applica questa formula per calcolare, data la perturbazione

$$H^{ext}(t) = -e \int d^3x \, j(x,t) \cdot A(x,t)$$

(dove A è una funzione assegnata), l'aspettazione della corrente j, al primo ordine nella perturbazione H^{ext} :

$$\langle j_{\alpha}(x,t) \rangle_{\psi}^{(1)} = \langle j_{\alpha}(x,t) \rangle_{\psi_0}$$

+ $e \iint d^3x' dt' \, \theta(t-t') \, \langle \, i[j_{\alpha}(x,t), j_{\beta}(x',t')] \, \rangle_{\psi_0} \cdot A_{\beta}(x',t') + \dots$

gli operatori a secondo membro sono tutti intesi in schema di Heisenberg del sistema imperturbato.

5.2 La formula di Kubo

Consideriamo un sistema di particelle in campo elettromagnetico esterno. Usiamo la notazione del capitolo 2. Il campo elettromagnetico A è esterno nel senso che non è un grado di libertà del problema, ma un c-numero fissato a piacere. La sua interazione con la materia è ottenuta con il solito meccanismo dell'accoppiamento minimale.

La hamiltoniana in assenza di campo esterno è

$$H = \sum_{\alpha} \frac{1}{2m_{\alpha}} \int d^3x \, |\nabla\varphi_{\alpha}(x)|^2 + V \quad ;$$

V è un potenziale efficace, che descrive le interazioni delle particelle con le altre particelle e con un eventuale *background* fissato. Questo potenziale rende conto della struttura specifica del sistema. Assumiamo che nel potenziale efficace compaiano le coordinate e i campi, ma non le derivate dei campi; le considerazioni che faremo possono essere in massima parte portate avanti senza assumere ulteriori ipotesi sulla forma di V.

Aggiungiamo, con il meccanismo standard dell'accoppiamento minimale, l'interazione con il campo elettromagnetico esterno. Siamo interessati a studiare solo proprietà magnetiche della materia, quindi possiamo porre il potenziale elettrostatico ψ uguale a 0, e considerare solo campi *A* statici. Eccezionalmente, potrà essere utile introdurre una dipendenza dal tempo in *A* corrispondente a uno switch-on adiabatico:

$$A \mapsto e^{\eta t} \cdot A \qquad \eta \to 0^+$$

La hamiltoniana del sistema di particelle nel campo esterno A è

$$H(A) = \sum_{\alpha} \frac{1}{2m_{\alpha}} \int d^3x \, |\nabla\varphi_{\alpha}(x) - e_{\alpha}A(x)|^2 + V$$

Il parametro A è il potenziale vettore del campo elettromagnetico, dunque non può essere del tutto arbitrario. Salvo se diversamente specificato, scegliamo per A la gauge di Coulomb

$$\nabla \cdot A = 0$$

Sviluppando il quadrato della hamiltoniana H(A), otteniamo H più un termine di interazione

$$\begin{split} H^{int} &= \sum_{\alpha} H^{int}_{\alpha} \quad , \\ H^{int}_{\alpha} &= -e_{\alpha} \int d^3x \, j^{part}_{\alpha}(x) \cdot A(x) + \frac{e^2_{\alpha}}{2m_{\alpha}} \int d^3x \, \rho^{part}_{\alpha}(x) A(x)^2 \, . \end{split}$$

in cui abbiamo introdotto la carica e la corrente di particelle

$$j^{part}(x) = \frac{1}{2mi} \left((\nabla \varphi)^* \varphi - \varphi^* \nabla \varphi \right)(x), \ \rho^{part}(x) = \varphi^* \varphi(x) \quad ,$$

per ognuna delle specie di particelle descritte dai campi φ_{α} . Consideriamo d'ora in poi, senza eccessiva perdita di generalità, il caso particolare in cui le cariche delle particelle e_{α} sono tutte dello stesso

ordine di grandezza e. Possiamo raccogliere gli addendi della perturbazione in due termini, uno del primo ordine in e e un altro del secondo ordine in e. I termini del secondo ordine in e sono essenziali per mantenere la gauge-invarianza della hamiltoniana.

Vogliamo calcolare la corrente indotta nel sistema dal campo esterno *A*. Per calcolare la corrente che attraversa il sistema, dobbiamo calcolare (vedi ad esempio [Mahan]) l'aspettazione dell'operatore gauge-invariante¹

$$j^{g.i.} = \sum_{lpha} e_{lpha} (j_{lpha} + e_{lpha}
ho_{lpha} A)$$
 .

Se A = 0, $j^{g.i.} = \sum_{\alpha} e_{\alpha} j_{\alpha}$; assumiamo che la media di questo operatore sullo stato fondamentale sia nulla. Questo è sempre vero se il sistema è invariante sotto parità o inversione temporale. Vogliamo calcolare il valore di aspettazione della corrente al primo ordine nel campo esterno A. Per calcolare l'aspettazione di $j^{g.i.}$ possiamo sfruttare le formule dedotte nel paragrafo 5.1: calcoliamo l'aspettazione al primo ordine nella hamiltoniana di interazione, e trascuriamo nel risultato tutti i termini di ordine maggiore o uguale al secondo in A. Correzioni a ordini successivi nell'hamiltoniana di interazione sono almeno del secondo ordine in A, e quindi non contribuiscono. Osserviamo che il risultato ottenuto è complessivamente del secondo ordine in e. L'applicazione diretta della formula 5.1 da il risultato seguente:

$$\langle j^{g.i.}(x,t) \rangle^{(1)} = j^{(I)}(x,t) + j^{(II)}(x,t)$$

in cui

$$\begin{aligned} j_i^{(I)}(x,t) &= \iint d^3x' dt' \,\theta(t-t') \,R_{ik}(x,t;x',t') \cdot A_k(x',t') \\ R_{ik}(x,t;x',t') &= \sum_{\alpha} e_{\alpha}^2 \langle i[(j_{\alpha}^{part})_i(x,t), (j_{\alpha}^{part})_k(x',t')] \rangle_0 \quad ; \\ j_i^{(II)}(x,t) &= \sum_{\alpha} \frac{e_{\alpha}^2}{2m_{\alpha}} \langle \rho_{\alpha}^{part}(x,t) \rangle_0 A_{\alpha}(x,t) \quad . \end{aligned}$$

¹euristicamente, la corrente delle particelle è uguale a

$$j = \sum_{\alpha} e_{\alpha} n_{\alpha} v_{\alpha} \quad ,$$

dove n_{α} , v_{α} sono la densità numerica e la velocità dell' α -esima specie di particelle. La velocità v non è semplicemente l'impulso diviso per la massa p/m, ma l'impulso gauge-invariante diviso la massa: (p - eA)/m.

Abbiamo introdotto la dipendenza di A dal tempo t per ricordare la presenza del fattore di switch-on adiabatico, che potrebbe essere utile per assicurare la convergenza degli integrali, ma che non scriviamo per non appesantire le formule. Ricordiamo che la aspettazione di $j^{g.i.}$ è calcolata sullo stato fondamentale della hamiltoniana H(A), mentre $j^{(I)}$, $j^{(II)}$ sono calcolate sullo stato fondamentale di H = H(A = 0), e gli operatori sono intesi nello schema di Heisenberg per il sistema imperturbato: evolvono con l'hamiltoniana H. Generalmente, i termini (I) e (II) in cui abbiamo scomposto la corrente gauge-invariante sono detti rispettivamente contributo paramagnetico e diamagnetico.

La formula per R si semplifica se assumiamo che il sistema sia omogeneo: in questo caso la formula dipende solo dalla differenza x - x'. Inoltre, se assumiamo che la hamiltoniana H non dipenda esplicitamente dal tempo, la formula dipende solo da t - t'. Conviene passare in trasformata di Fourier: riscriviamo anche la hamiltoniana di interazione come

$$H^{(1)} = -\int \frac{d^3q}{(2\pi)^3} j^{part}(q) \cdot A(-q)$$

(qui e in seguito indicheremo con j(q) la trasformata di Fourier di j(x), sperando che il contesto chiarisca ogni ambiguità). Riscriviamo le espressioni per $j^{(I)}$, $j^{(II)}$ in trasformata di Fourier:

$$j_i^{(II)}(q) = \sum_{\alpha} \frac{e_{\alpha}^2}{2m_{\alpha}} \langle \rho_{\alpha}^{part} \rangle_0 A_i(q) \quad ;$$

(se il sistema è omogeneo la aspettazione di ρ_{α}^{part} è costante)

$$j_i^{(I)}(q) = \sum_{\alpha} e_{\alpha}^2 \int \frac{d^3 q'}{(2\pi)^3} \int_{-\infty}^0 dt$$
$$\langle i[(j_{\alpha}^{part})_i(q,0), (j_{\alpha}^{part})_k(-q',t)] \rangle_0 A_k(q',t)$$

Se la hamiltoniana commuta con l'impulso, l'aspettazione del commutatore contiene un fattore $(2\pi)^3\delta^3(q-q')$ che si integra immediatamente; questa osservazione permette di scrivere la formula di Kubo in maniera sintetica

$$\langle j^{g.i.}(q)_i \rangle^{(1)} = G_{ik}(q) A_k(q) \quad ,$$
$$G_{ij}(q) = \sum_{\alpha} e_{\alpha}^2 \int_{-\infty}^0 dt \, \langle i[(j_{\alpha}^{part})_i(q,0), (j_{\alpha}^{part})_k(-q,t)] \rangle_0$$

$$+\sum_{\alpha}rac{e_{\alpha}^{2}}{2m_{\alpha}}\langle
ho_{lpha}^{part}
angle _{0}\delta_{ik}$$

Studieremo le proprietà generali di G nel capitolo 6. In generale, se il campo A dipende dal tempo G dipende anche dalla frequenza ω . Il fattore difficile da calcolare in questa formula è il commutatore (a tempi diversi) corrente-corrente; fortunatamente, vedremo che per soddisfare il criterio di superconduttività non è necessario conoscere tutta la funzione di risposta, ma solo il suo valore al limite $q \rightarrow 0$.

5.3 Il procedimento di Kubo

Immaginiamo di analizzare un certo campione metallico in laboratorio, per capire se sia superconduttore oppure no. Tipicamente, sottoponiamo il campione a un opportuno "segnale in ingresso", ad esempio un campo esterno, e misuriamo un certo "segnale in uscita", ad esempio la corrente indotta. Se il segnale in ingresso è di piccola intensità, è ragionevole aspettarsi che il segnale in uscita sia proporzionale al segnale in ingresso: questa situazione è ben descritta dalla teoria della risposta lineare. Le proprietà del sistema sono contenute nella forma del coefficiente di risposta.

La formula di Kubo è una espressione quantistica per il coefficiente di risposta lineare di un sistema di particelle, brevemente detto "materia", con cui possiamo calcolare la corrente di particelle indotta da un campo elettromagnetico esterno. La formula di Kubo è stata derivata nel paragrafo 5.2.

Nel capitolo 3 abbiamo visto che, in un contesto classico, possiamo discutere l'effetto Meissner, ovvero la superconduttività di un certo mezzo materiale, studiando la risposta del mezzo a una corrente esterna j^{ext} . La discussione si basa essenzialmente su due ingredienti: le equazioni di Maxwell, e la formula per la corrente interna indotta dal campo magnetico, in regime di risposta lineare.

La corrente esterna j^{ext} genera un campo elettromagnetico A^{ext} , che induce ulteriore corrente; all'equilibrio, il campo elettromagnetico totale A soddisfa le equazioni di Maxwell con corrente totale $j^{ext} + j^{ind}$, e la corrente indotta j^{ind} è uguale a

$$j^{ind}(k,\omega) = G(k,\omega)A(k,\omega)$$
;

G è la funzione di risposta. Nella formula della risposta lineare compare il campo totale, e non il campo esterno generato da j^{ext} : questo punto è molto importante. L'effetto Meissner è legato al valore di $G(k \to 0, \omega \to 0)$.

Il procedimento di Kubo è una semplice prescrizione che permette di discutere l'effetto Meissner in un mezzo materiale fatto di particelle quantistiche. Possiamo modificare in modo molto semplice il ragionamento fatto per i mezzi materiali classici, sostituendo all'espressione classica di G la funzione calcolata con la formula di Kubo. Per l'esattezza, il procedimento di Kubo per discutere l'effetto Meissner consiste precisamente di due passaggi essenziali:

- si sfrutta la formula di Kubo per calcolare la funzione di risposta a un campo esterno della "materia", ovvero del sistema di sole particelle;
- si calcola la corrente di particelle indotta sostituendo nella formula di Kubo il campo totale invece del campo esterno.

Il campo totale è la somma del campo esterno e del campo interno che la corrente esterna induce nel sistema. Il procedimento di Kubo si presenta come la più semplice generalizzazione della discussione dell'effetto Meissner per sistemi di particelle quantistiche [Mahan] [Jones].

Il procedimento di Kubo che abbiamo descritto è essenzialmente una prescrizione semiclassica: le particelle che compongono il solido sono trattate quantisticamente, ma il campo elettromagnetico è un oggetto classico che obbedisce alle equazioni di Maxwell. Inoltre, il procedimento di Kubo sfrutta l'approssimazione di risposta lineare per determinare la corrente indotta. Le approssimazioni coinvolte possono sembrare chiaramente stabilite; tuttavia, presentato in questa forma semplicistica, il procedimento di Kubo contiene delle inconsistenze e ci sono delle sottigliezze che ne impediscono un'applicazione *naif*:

- l'inclusione del campo interno nella formula di Kubo ha degli aspetti apparentemente paradossali: per essere consistenti, il campo interno dev'essere trattato come un grado di libertà (quantistico) del sistema di materia;
- a noi interessa la formula di Kubo nel limite k → 0, cioè nel limite di campi statici; la discussione di questo limite è, come

vedremo, la discussione di un "effetto di bordo", ed è molto delicata.

Nel seguito del paragrafo spieghiamo l'origine delle problematiche elencate, che svilupperemo approfonditamente nei capitoli 6, 7, 9.

Risposta lineare

Esaminiamo in dettaglio la logica del procedimento di Kubo. La formula di Kubo discute la risposta di un sistema di particelle a un campo elettromagnetico esterno: le particelle in questione non interagiscono elettromagneticamente, sono solo minimalmente accoppiate al campo esterno [Jones]. La hamiltoniana del sistema è

$$H = H_0^{part} + e \int j^{part} \cdot A^{ext} + e^2/2m \int \rho^{part} (A^{ext})^2$$

Tuttavia, nella discussione dell'effetto Meissner al capitolo 3, abbiamo notato che è essenziale che la corrente indotta dal campo esterno generi a sua volta un campo elettromagnetico interno; da cui la necessità di discutere la risposta non solo al campo A^{ext} generato dalla corrente esterna j^{ext} , ma al campo elettromagnetico totale $A^{tot} = A^{ext} + A^{int}$. Perciò dobbiamo aggiungere al sistema di materia un altro grado di libertà (<u>quantistico</u>), il campo elettromagnetico interno A^{int} ; la hamiltoniana deve essere corretta nel modo seguente (vedi anche [Mahan]):

$$H^{tot} = H + H_0^{e.\,m.}(A^{int}) + H^{int}(part, A^{int})$$

Ma questa non è l'hamiltoniana utilizzata per discutere la formula di Kubo vera e propria. La formula di Kubo discute la risposta a un campo esterno di un sistema di sola materia, non di un sistema accoppiato di materia e campo elettromagnetico. E al tempo stesso l'uso di un campo "totale" nella formula di Kubo presuppone che il sistema sia in grado di generare un campo "interno", cioè che sia un sistema non di sola materia, ma un sistema accoppiato di materia e campo elettromagnetico.

Sistemazione del procedimento di Kubo

Nella letteratura, il problema viene affrontato sbrigativamente con l'introduzione di opportune costanti dielettriche che esprimono il campo totale in funzione del campo esterno, la cui determinazione è comunque un problema più complesso del problema iniziale. Inoltre, non è assolutamente chiaro, nei termini in cui è stata posta la questione, se il procedimento di Kubo sia logicamente consistente, e quindi se sia un procedimento valido per discutere la superconduttività, oppure sia una prescrizione ad hoc valida solo in certi casi. Questo problema sembra un poco sottovalutato nell'ambito della letteratura ([Mahan], [Jones]); tuttavia, la fondatezza del procedimento di Kubo è un nodo essenziale da sciogliere, per costruire un'analisi della superconduttività, in termini di effetto Meissner, a partire da una descrizione quantistica microscopica dei mezzi materiali come sistemi di particelle. Osserviamo che la funzione di risposta di un mezzo non è calcolabile nell'ambito della teoria classica (capitolo 3), ma lo è, almeno in linea di principio, nell'ambito di questa descrizione quantistica del mezzo: estendere la discussione dell'effetto Meissner dal contesto classico al contesto quantistico costituisce un grande passo avanti nella comprensione fisica del problema.

Nel capitolo 9 facciamo vedere che il procedimento di Kubo può essere ricondotto all'interno di un'approssimazione variazionale alla Hartree-Fock, abbinata alla teoria della risposta lineare, per sistemi quantistici di materia e campo elettromagnetico. Il sistema totale è accoppiato a una corrente esterna assegnata j^{ext} . Il punto di partenza è il seguente: approssimiamo lo stato fondamentale con uno stato prodotto, della forma

 $\psi = \psi^{part} \otimes \psi^{e.\,m.}$

ovvero nel prodotto di uno stato di materia e di uno stato di campo elettromagnetico. Vedremo che lo stato del campo elettromagnetico è coerente, e come tale si interpreta naturalmente come il campo classico totale all'interno del mezzo. In questo modo il sistema è essenzialmente "scomposto" in due sottosistemi; la corrente di particelle, nel sottosistema della materia, è calcolata al primo ordine nel campo classico totale (formula di Kubo). In questo schema possiamo dare perfettamente senso all'uso della formula di Kubo, per un sistema di "sola materia" in campo esterno, e all'uso del campo elettromagnetico (classico) totale all'interno della formula stessa. Nel capitolo 9 descriviamo in dettaglio questo metodo di approssimazione, ne discutiamo l'applicazione in sistemi semplici, e la rilevanza nel descrivere aspetti non perturbativi di sistemi più complessi e

realistici.

Abbiamo ricostruito il procedimento di Kubo all'interno di questo schema logicamente coerente. Possiamo dire che la discussione dell'effetto Meissner nei sistemi quantistici poggia essenzialmente su due approssimazioni: la risposta lineare al campo totale, e la fattorizzazione dello stato fondamentale. La risposta lineare è una buona approssimazione se il sistema soddisfa ai semplici requisiti fisici:

- la reazione del sistema sull'apparato che produce la sollecitazione (la corrente esterna) è trascurabile;
- il campione è privo di isteresi.

La prima ipotesi riflette il fatto che abbiamo schematizzato j^{ext} come un c-numero; non pone problemi significativi e non la commenteremo oltre. La seconda è invece un poco più delicata, perché stiamo supponendo che lo stato fondamentale della materia in campo esterno non dipenda dalla storia passata del sistema, ma solo dalla configurazione finale del campo, purché il sistema abbia avuto un tempo sufficiente per stabilizzarsi. In termini matematici, affermiamo che lo stato fondamentale (della materia) a j^{ext} fissata esiste ed è unico. Questa ipotesi, che è falsificata per esempio in molti fenomeni magnetici, è assolutamente necessaria nella nostra trattazione, e non si può prescinderne. Queste ipotesi sono familiari, facilmente verificabili; purtroppo, non è altrettanto chiara la contropartita fisica dell'avere approssimato lo stato fondamentale con uno stato fattorizzato di materia e campo elettromagnetico. Certamente, l'analisi della validità di questa approssimazione è intimamente legata all'analisi dei suoi contenuti non perturbativi.

Sistemi infiniti, perturbazioni locali

Supponiamo di aver formalizzato in modo soddisfacente, logicamente chiuso, il procedimento di Kubo. La formula di Kubo è la risposta, in corrente, a un campo esterno *A*, il campo elettromagnetico (classico) totale all'interno del 'mezzo materiale'. Il 'mezzo', o la 'materia', è un sistema infinitamente esteso di particelle quantistiche, atomi ed elettroni; soffermiamoci un momento per commentare questa scelta. Consideriamo il campione metallico introdotto all'inizio del paragrafo, di cui ci chiediamo se sia superconduttore o no; si tratta ovviamente di un oggetto di dimensioni finite, ma per chiarezza e per comodità preferiamo schematizzarlo come un sistema di particelle infinitamente esteso. Normalmente, diciamo che questo consente di eliminare gli effetti del bordo, per studiare le sole proprietà di bulk del sistema. Inoltre l'invarianza per traslazioni spesso semplifica di molto le formule, rendendo i risultati più significativi e leggibili. Tuttavia, l'uso di un sistema infinito è particolarmente opportuno per discutere la formula di Kubo soprattutto per il motivo che introduciamo adesso. Normalmente, nel contesto dei sistemi infinitamente estesi si discutono le perturbazioni locali, ovvero limitate a una regione finita di spazio; perturbazioni non locali, anche se proporzionali a una costante di accoppiamento arbitrariamente piccola, sono generalmente singolari e richiedono opportuni limiti [Haag] [Bratteli I]. Perciò consideriamo perturbazioni in cui il campo elettromagnetico A è a supporto in una regione limitata. Saremo particolarmente interessati perturbazioni dovute a un campo A costruito nel modo seguente (configurazione a): A è nullo fuori da una regione limitata X, costante (non nullo) all'interno di X, si raccorda con regolarità in una regione di spessore ε intorno al bordo di X. La formula di Kubo definisce la (aspettazione della) corrente di particelle gauge-invariante $\langle j^{g.i.} \rangle$, in termini del coefficiente di Kubo G, che dipende solo dalle proprietà del sistema non perturbato dal campo magnetico, e dal potenziale vettore A:

$$\langle j^{g.i.} \rangle(k) = G(k)A(k)$$

Per noi è interessante il limite $k \to 0$: per la configurazione di campo introdotta sopra, il limite $k \to 0$ equivale al limite in cui il volume della regione X va all'infinito. Anticipando un risultato, fisicamente abbastanza intuitivo, del capitolo 6, affermiamo che la corrente gauge-invariante calcolata con la formula di Kubo dipende essenzialmente solo dal valore del campo A sul bordo della regione X. Dunque la discussione del limite $k \to 0$ corrisponde alla discussione di un contributo di bordo, quando questo bordo va all'infinito. Si capisce immediatamente che è essenziale, per discutere le proprietà di questo bordo, che il problema non sia ulteriormente complicato dalla presenza di ulteriori effetti di bordo dovuti al fatto che il campione è contenuto in un volume finito. Osserviamo anche che la perturbazione data da un campo A costante in tutto lo spazio, oltre a essere non legittima (non è locale) e fisicamente poco significativa (è gauge-equivalente a un campo nullo), è anche altamente ambigua: visto che il contributo essenziale alla formula viene da un bordo, la conoscenza di come questo bordo va all'infinito è assolutamente significativa per la discussione della formula di Kubo.

Problemi minori

Nella nostra introduzione abbiamo calcolato la aspettazione della corrente gauge-invariante indotta da un campo magnetico statico *A*, in un sistema omogeneo di particelle quantistiche, al primo ordine in *A*, con l'ausilio della teoria della risposta lineare. Questa formula è nota in letteratura come formula di Kubo [Mahan] [Jones]. Tuttavia, in letteratura sono presenti varie altre versioni di questa formula, anch'esse note come "formula di Kubo", che ad esempio discutono sistemi di particelle a temperatura finita [Mahan].

Abbiamo scelto di utilizzare la versione della "formula di Kubo" derivata al paragrafo 5.2 per mantenere la discussione il più possibile semplice ed essenziale. Gli aspetti della superconduttività che prendiamo in esame (capitolo 6) sono essenzialmente gli effetti di bordo e la massa del fotone (effetto Meissner), che possiamo discutere in tutta generalità per sistemi a temperatura 0: l'aggiunta di una temperatura finita non sembra essere particolarmente rilevante per questo tipo di questioni.
Capitolo 6

Aspetti generali della formula di Kubo

In questo capitolo discutiamo il contenuto della formula di Kubo, in termini molto generali. Consideriamo sistemi di particelle quantistiche in campo esterno, assumendo l'equazione di continuità per la corrente di particelle. Il campo magnetico che compare nelle formule è il campo (classico) totale all'interno del sistema di particelle: la consistenza di questa prescrizione, che costituisce un punto essenziale del procedimento di Kubo per la discussione dell'effetto Meissner, verrà affrontata nel capitolo 9. Una parte notevole della nostra speculazione verte sulla forma della aspettazione del commutatore corrente-corrente che compare nella formula di Kubo.

6.1 Regole di somma

Studiamo alcune proprietà generali del coefficiente della formula di Kubo introdotto nel paragrafo 5.2. I vincoli sulla forma della funzione di risposta che otterremo discendono da assunzioni molto generali sui sistemi di particelle considerati, come covarianza e conservazione della corrente. Ricordiamo la definizione convenzionale della corrente di particelle j^{part} e la densità di particelle ρ^{part} :

$$j^{part}(x) = \frac{1}{2mi} \left(\nabla \psi^*(x) \psi(x) - \psi^*(x) \nabla \psi(x) \right) \qquad \rho^{part}(x) = \psi^*(x) \psi(x) \quad .$$

Lavoriamo per semplicità con una sola specie di particelle, di carica e e massa m. L'aspettazione sullo stato fondamentale della

corrente gauge-invariante j che attraversa un solido, dato il campo elettromagnetico esterno A, vale, in regime di risposta lineare:

$$\langle j_{\alpha}(x,t) \rangle_{(1)}$$

$$= e^{2} \iint d^{3}x' dt' \,\theta(t-t') \,\langle i[j_{\alpha}^{part}(x,t), j_{\beta}^{part}(x',t')] \rangle_{(0)} \cdot A_{\beta}(x',t')$$

$$+ \frac{e^{2}}{m} \,\langle \rho^{part}(x,t) \rangle_{(0)} \,A_{\alpha}(x,t) \quad . \tag{6.1}$$

Ricordiamo che $A_{\alpha}(x,t)$ è una funzione assegnata che soddisfa alle condizioni della gauge di Coulomb (salvo dove diversamente specificato); l'operatore $j_{\alpha}^{part}(x,t)$ è la corrente di particelle non gaugeinvariante, ovvero la corrente definita a partire dall'impulso non minimalmente accoppiato.

In questo paragrafo vogliamo mostrare come, con opportune manipolazioni, possiamo riscrivere la formula in considerazione in una forma più interessante. Dimostriamo prima la seguente identità algebrica (nella derivazione di questa identità, j è in realtà j^{part}):

$$i[j_{\alpha}(xt), j_{\beta}(x't')] = \\ \partial_{\gamma}' \left\{ i[j_{\alpha}(xt), j_{\gamma}(x't')] (x'-x)_{\beta} \right\} + (x'-x)_{\beta} i[j_{\alpha}(xt), \partial_{t}'\rho(x't')]$$
(6.2)

Le derivate primate sono derivate rispetto alla coordinata x'. Per dimostrare questa identità osserviamo che

$$\partial_{\alpha} x_{\beta} = \delta_{\alpha\beta} \quad ; \quad$$

riscriviamo

$$i[j_{\alpha}(xt), j_{\beta}(x't')]$$

come

$$i[j_{\alpha}(xt), j_{\gamma}(x't')]\delta_{\gamma\beta} = i[j_{\alpha}(xt), j_{\gamma}(x't')]\partial_{\gamma}'(x'-x)_{\beta} \quad ;$$

usando la regola di Leibnitz per le derivate,

$$i[j_{\alpha}(xt), j_{\gamma}(x't')]\partial_{\gamma}'(x'-x)_{\beta} =$$

$$\partial_{\gamma}^{\prime}\left\{i[j_{\alpha}(xt),j_{\gamma}(x^{\prime}t^{\prime})](x^{\prime}-x)_{\beta}\right\}-(x^{\prime}-x)_{\beta}i[j_{\alpha}(xt),\partial_{\gamma}^{\prime}j_{\gamma}(x^{\prime}t^{\prime})]$$

che con l'equazione di continuità per la corrente

$$\partial_t \rho^{part}(x,t) + \partial_\alpha j^{part}_\alpha(x,t) = 0$$

diventa finalmente la formula 6.2.

Ricordiamo che siamo interessati allo studio di effetti magnetici statici, in particolare l'effetto Meissner. Quindi il campo esterno A non dipende dal tempo, o dipende molto lentamente, con un fattore $e^{\eta t'}$ di switch-on adiabatico che utilizzeremo se necessario per assicurare la convergenza degli integrali. Possiamo sostituire la 6.2 nella formula 6.1:

$$\begin{split} \langle j(x,t)\rangle_{(1)} &= e^2 \iint d^3x' dt' \,\theta(t-t') \,A_\beta(x',t') \\ \cdot \left[\langle \partial_\gamma' \left\{ i[j_\alpha(xt), j_\gamma(x't')](x'-x)_\beta \right\} + (x'-x)_\beta i[j_\alpha(xt), \partial_t' \rho(x't')] \rangle_{(0)} \right] \\ &+ \frac{e^2}{m} \,\langle \rho^{part}(x,t) \rangle_{(0)} \,A_\alpha(x,t) \quad . \end{split}$$

L'integrale in t' del termine contenente $\partial'_t \rho^{part}$ è immediato. Il risultato è un commutatore a tempi uguali fra ρ e j, che si calcola algebricamente:

$$i[j_{\alpha}(xt), \rho(x't)] = -\frac{1}{m}\partial_{\alpha}\delta(x-x')\cdot\rho(x)$$

Torniamo all'espressione per la corrente di Kubo. L'integrale nel tempo del termine $\partial_t \rho$ produce un commutatore a tempi uguali, che si calcola e da origine a una (derivata di) δ di Dirac. Questo oggetto si integra facilmente in x'; il risultato è un contributo che si cancella esattamente con l'ultimo termine $\langle \rho \rangle \cdot A$, che era necessario per mantenere la gauge-invarianza. In dettaglio:

$$\iint d^{3}x'dt'\,\theta(t-t')\,(x'-x)_{\beta}\,\langle\,i[j_{\alpha}(xt),\partial_{t}'\rho(x't')]\,\rangle_{(0)}\,\cdot A_{\beta}(x')$$

$$=\int d^{3}x'\,(x'-x)_{\beta}\,\langle\,i[j_{\alpha}(xt),\rho(x't)]\,\rangle_{(0)}\,\cdot A_{\beta}(x')$$

$$=-\frac{1}{m}\int d^{3}x'\,(x'-x)_{\beta}\partial_{\alpha}\delta(x-x')\,\langle\rho(x,t)\rangle_{(0)}\,\cdot A_{\beta}(x')$$

$$=-\frac{1}{m}\langle\rho(x,t)\rangle_{(0)}\partial_{\alpha}\left((x-x')_{\beta}A_{\beta}(x')\right)|_{x'=x}$$

$$=-\frac{1}{m}\langle\rho(x,t)\rangle_{(0)}A_{\alpha}(x)$$

Il termine ottenuto cancella esattamente uno dei contributi alla aspettazione della corrente gauge-invariante. Dopo la cancellazione:

$$\langle j_{\alpha}(x,t) \rangle_{(1)} =$$

$$e^{2} \iint d^{3}x'dt' \,\theta(t-t') \,\langle \partial_{\gamma}' \left\{ i[j_{\alpha}(xt), j_{\gamma}(x't')](x'-x)_{\beta} \right\} \rangle_{(0)} \cdot A_{\beta}(x',t')$$

Se c'è invarianza per traslazioni, il commutatore corrente-corrente dipende soltanto dalla differenza x - x'. Scriveremo per comodità:

$$\langle j_{\alpha}(x,t) \rangle_{(1)} = \iint d^3x' dt' \,\theta(t-t') \,\partial_{\gamma}' \mathcal{F}_{\alpha\beta\gamma}(x-x',t-t') \cdot A_{\beta}(x') \quad (6.3)$$

in cui

$$\mathcal{F}_{\alpha\beta\gamma}(x-x',t-t') = e^2 \langle \left\{ i[j_\alpha(xt),j_\gamma(x't')](x'-x)_\beta \right\} \rangle_{(0)}$$

Questa è la scrittura notevole della formula di Kubo cui volevamo arrivare. Nei paragrafi successivi commenteremo alcuni aspetti interessanti di questa formula.

Un'osservazione conclusiva: il calcolo dell'integrale del commutatore a tempi uguali si può più correttamente calcolare scrivendo i campi quantistici con una base ortonormale di funzioni test qualsiasi, e sfruttando le relazioni di ortogonalità e completezza per fare gli integrali. Questo metodo consente di evitare l'uso delle δ di Dirac. Il risultato ottenuto per questa via coincide in ogni caso con quello riportato.

6.2 Il problema della gauge

Facciamo un'osservazione semplice, ma non banale, sulla formula di Kubo 6.1:

$$\langle j^{g.i.}(x)\rangle = e \int d^3x' G_{Kubo}(x-x') A(x') \quad ;$$

la formula esprime una quantità gauge-invariante, la corrente, in termini del potenziale vettore A del campo elettromagnetico. Il coefficiente G è dipende dalle proprietà del sistema di sola materia, e quindi è gauge-invariante. Richiediamo che, tuttavia, l'espressione sia invariante per le trasformazioni di gauge

$$A_i(x) \mapsto A_i(x) + \partial_i \Lambda(x)$$

per una generica funzione scalare $\Lambda(x)$. Non è difficile convincersi del fatto che questo è vero per A, Λ arbitrari se e solo se la funzione di risposta soddisfa la relazione

$$\partial_j \left[G_{Kubo} \right]_{ij} (x) = 0$$

Non è difficile verificare che il G_{Kubo} soddisfa automaticamente a questa relazione, con calcoli simili a quelli del paragrafo 6.1. In particolare, questa formula ci dice una volta di più che la formula di Kubo non è significativa per un campo A uniforme in tutto lo spazio: si veda la discussione al paragrafo 5.3. Le perturbazioni legittime sono quelle locali: il campo A dev'essere scelto a supporto in una regione limitata di spazio.

In trasformata di Fourier, la condizione di gauge-invarianza per G_{Kubo} , o semplicemente G, si scrive

$$k_j G_{ij}(k) = 0$$

Per piccoli k, la covarianza impone che G sia della forma¹

$$G_{ij}(k) = f(k^2)\delta_{ij} + g(k^2)\frac{k_ik_j}{k^2}$$
;

ma la condizione di gauge-invarianza fissa il valore di g:

$$G_{ij}(k) = f(k^2) \left[\delta_{ij} - \frac{k_i k_j}{k^2} \right]$$

Il confronto diretto con gli argomenti riportati al paragrafo 3.1 ci dice che la presenza (assenza) di effetto Meissner equivale a $f(k^2 \rightarrow 0) > 0$ $(f(k^2 \rightarrow 0) = 0)$. Notiamo che nella formula di Kubo, calcolata al paragrafo 5.2, abbiamo distinto nella funzione di risposta i due contributi paramagnetico e diamagnetico: il secondo è sempre proporzionale a δ_{ij} . Il primo è proporzionale all'integrale nel tempo del commutatore corrente-corrente

$$\int_{-\infty}^{0} dt \left\langle i[j_{i}^{part}(x0), j_{j}^{part}(0t)] \right\rangle \quad .$$

Il termine non locale

$$\frac{k_i k_j}{k^2} \sim \partial_i \partial_j \frac{1}{|x|} \quad ,$$

se presente, è necessariamente contenuto nel commutatore correntecorrente. Una non località contenuta all'interno della funzione di Green corrente-corrente di un sistema di particelle è quindi, in definitiva, la proprietà decisiva per stabilire se il sistema esibisce effetto Meissner.

Torniamo alla discussione del campo magnetico nella formula di

¹le funzioni f, g usate qui non sono in generale uguali a quelle del paragrafo 6.6

Kubo: ci interessano perturbazioni locali, per cui scegliamo il campo A fra le funzioni regolari a supporto compatto. Notiamo che le perturbazioni

$$e \int d^3x \, j^{part}(x) \cdot A(x) \,, \quad \frac{e^2}{2m} \int d^3x \, \rho(x) A^2(x)$$

definiscono operatori locali appartenenti all'algebra delle osservabili del sistema, se in queste formule guardiamo ad A, A^2 come a funzioni test.

Campi lentamente variabili

Il vincolo del supporto compatto elimina l'ambiguità dovuta alle trasformazioni di gauge globali; guardiamo più in dettaglio alle trasformazioni di gauge locali. Per discutere l'effetto Meissner, occorre considerare campi lentamente variabili (limite $k \rightarrow 0$, paragrafo 5.3). Stiamo considerando un mezzo materiale in \mathbb{R}^3 , omogeneo e isotropo, infinitamente esteso; sia X una regione finita del mezzo, di volume V, in cui il potenziale vettore sia non nullo. Nella fattispecie, supponiamo che il campo A sia costante nell'interno della regione X, e vada a 0 al bordo della regione X (configurazione a del campo). Naturalmente, la regione di variazione del campo A, circostante il bordo, deve avere uno spessore ε finito perché il raccordo fra il campo interno e il campo esterno a X sia regolare. Supponiamo anche, per concretezza, che il campo A non sia banale, cioè gauge-equivalente a 0. Il limite di campi statici si ha per $V \to \infty$. Possiamo fare una trasformazione di gauge locale all'interno della regione X e porre uguale a 0 la parte costante di A all'interno di X (configurazione b del campo). In questo caso è evidente che

la perturbazione dipende essenzialmente da una regione localizzata intorno al bordo di X: in effetti, il campo magnetico $B = \nabla \wedge A$ è a supporto intorno al bordo della regione X, e intuitivamente ci aspettiamo che gli effetti della perturbazione sul sistema dipendano soltanto dalla regione in cui B è non nullo. Stiamo discutendo gli effetti sul sistema di un campo magnetico localizzato sul bordo di una regione X, nel limite in cui il bordo va all'infinito; vedremo che nei superconduttori la perturbazione data da un "bordo" può avere effetti di "volume", e quindi questa discussione non è banale come potrebbe sembrare a prima vista. Riassumendo: per discutere la superconduttività, ci interessa il limite della formula di Kubo per campi lentamente variabili $(k \rightarrow 0)$; in termini del campo *A* introdotto, il limite $k \rightarrow 0$ corrisponde al limite in cui il bordo della regione *X* tende all'infinito. Se la risposta di Kubo *G* è non nulla in questo limite, il campo magnetico "di bordo" produce effetti "di volume", come discuteremo ai paragrafi 6.3, 6.5.

Anticipando i risultati accennati, vedremo gli effetti "di volume" nei superconduttori in termini di variazione della densità di corrente e di energia del sistema. Si tratta di un fenomeno estremamente interessante: nel sistema superconduttore sono presenti correlazioni a lungo raggio, che sono invece assenti nei sistemi normali. Per un superconduttore le condizioni al bordo non sono soppresse nel limite termodinamico $V \to \infty$, ovvero all'allargarsi della regione X. In questo senso, la superconduttività è equivalente alla presenza di questi "effetti di bordo": in modo improprio ma espressivo, diciamo che la superconduttività stessa è, in questo senso, un effetto di bordo. Notiamo infine che la presenza delle correlazioni a lungo raggio è equivalente alla presenza di un termine non locale nella funzione di Green corrente-corrente:

$$\int dt \left[j_{\alpha}(00), j_{\beta}(xt) \right] \sim \partial_{\alpha} \partial_{\beta} \frac{1}{|x|} + \cos t \cdot \delta_{\alpha\beta} \quad .$$

6.3 Risposta di Kubo come effetto di bordo

Proseguiamo la discussione degli "effetti di bordo" in superconduttività, iniziata nel paragrafo precedente: in un mezzo di particelle quantistiche, infinitamente esteso, consideriamo una regione limitata X, all'interno della quale il campo A è costante, e scende rapidamente a 0 in un intorno del bordo di X. Il mezzo in questione è perturbato da un campo magnetico, localizzato nella regione circostante il bordo di X, dunque essenzialmente presente solo sulla superficie ∂X . Ci interessa capire la struttura delle correnti di particelle che questo campo magnetico esterno induce sul sistema. Utilizziamo la formula 6.3 che abbiamo ricavato nel paragrafo 6.1:

$$\langle j_{\alpha}(x,t) \rangle_{(1)} = \iint d^3x' dt' \,\theta(t-t') \,\partial_{\gamma}' \mathcal{F}_{\alpha\beta\gamma}(x-x',t-t') \cdot A_{\beta}(x') \quad .$$

Ricordiamo che la dipendenza temporale del campo A consiste unicamente in un fattore di switch-on adiabatico $e^{\eta t}$, $\eta \to 0^+$, che eventualmente useremo come regolatore dell'integrale nel tempo che definisce G_{Kubo} , ma in generale ometteremo di scrivere per semplicità. Introduciamo la nuova variabile $\tau = t' - t$: sia

$$-F(x-x') = \int_{-\infty}^{0} d\tau \,\mathcal{F}(x-x',-\tau)$$

Sappiamo che la densità di corrente indotta da un campo magnetico lentamente variabile, come conseguenza della formula di Kubo 6.1, è non nulla anche per $k \to 0$ nei sistemi superconduttori, in cui $G(k \to 0) > 0$. Mostriamo che tale densità di corrente non nulla, uniforme in tutto lo spazio (guardiamo la componente di Fourier k = 0) è originata solo da un contributo di bordo. Il potenziale vettore A è nullo fuori dalla regione limitata X, costante all'interno di X e si raccorda con continuità sul bordo di X. Usiamo la formula 6.3: se

$$\langle j_{\alpha}(x,t) \rangle_{(1)} = -\int d^3x' \,\partial_{\gamma}' F_{\alpha\beta\gamma}(x-x') \cdot A_{\beta}(x')$$

allora possiamo integrare per parti:

$$\langle j_{\alpha}(x,t) \rangle_{(1)} = \int d^3x' F_{\alpha\beta\gamma}(x-x') \cdot \partial'_{\gamma} A_{\beta}(x')$$

 $\partial_{\gamma}A_{\beta}$, che ha le dimensioni di un campo magnetico, è a supporto su una regione di spessore ε circostante il bordo. Da questa scrittura è manifesto che l'aspettazione della corrente gauge-invariante riceve contributo solo dal bordo della regione *X*. A questo punto potremmo calcolare il limite per $k \to 0$, mandando il bordo di *X* all'infinito.

In conclusione: in un sistema superconduttore, un campo magnetico localizzato sul bordo di una regione grande ma finita X genera una densità di corrente non nulla all'interno della regione X, mentre la corrente generata è nulla nei sistemi "normali". Un campo magnetico "di bordo" induce un effetto "di volume". Il volume di Xscala come L^3 , mentre la superficie scala come L^2 : normalmente, ci aspettiamo che gli effetti del bordo (il campo magnetico) siano soppressi nel limite $L \to \infty$. Se questi effetti di bordo non sono soppressi, il sistema supporta delle correlazioni a lungo raggio.

Un sistema di particelle superconduttore è caratterizzato dalla presenza di correlazioni a lungo raggio, per le quali un campo magnetico localizzato sul bordo di una regione estesa induce una variazione della densità di corrente sull'intero volume della regione.

Osserviamo che, data la sensibilità del sistema superconduttore agli effetti di bordo, è assolutamente necessario considerare perturbazioni locali di un sistema infinito (paragrafo 5.3). La discussione di perturbazioni esclusivamente locali non nasce dall'esigenza di tenere sotto controllo la struttura matematica della teoria (certamente è utile anche per questo!), ma è una richiesta fisica fondamentale per capire la superconduttività, le cui origini sono nascoste in "effetti di bordo" la cui discussione è estremamente delicata.

Una curiosità: in termini di F, possiamo scrivere la formula di Kubo come

$$\langle j_{\alpha}(x,t) \rangle_{(1)} = \int d^3x' \,\partial_{\gamma} F_{\alpha\beta\gamma}(x-x') \cdot A_{\beta}(x')$$

= $\partial_{\gamma} \int d^3x' F_{\alpha\beta\gamma}(x-x') \cdot A_{\beta}(x')$.

Abbiamo sfruttato il fatto che $\partial' f(x - x') = -\partial f(x - x')$ e portato la derivata rispetto a *x* fuori dall'integrale in *x'*. Questa formula mostra che la corrente indotta da *A* è una divergenza:

$$j_{\alpha}(x) = \partial_{\gamma} J_{\alpha\gamma}(x)$$

6.4 Energia di un sistema in campo magnetico

Calcoliamo il valore dello spostamento dell'energia dal livello fondamentale di un sistema quantistico, a seguito di una perturbazione elettromagnetica. Per fissare le idee, limitiamoci a considerare un sistema elettromagnetico (non relativistico) con una sola specie di particelle cariche, come abbiamo fatto finora; siano e, m rispettivamente la carica e la massa della particella in esame. Sia H_0 l'hamiltoniana imperturbata del sistema, senza il campo elettromagnetico; aggiungiamo la perturbazione

$$H_{int} = e \int d^3x \, j^{part}(x) \cdot A(x) + \frac{e^2}{2m} \int d^3x \, \rho^{part}(x) A^2(x) \quad ;$$

il campo A è regolare, lentamente variabile, a supporto limitato. Per comodità, dividiamo l'interazione in due parti:

$$H_1 = e \int d^3x \, j^{part}(x) \cdot A(x) \qquad H_2 = \frac{e^2}{2m} \int d^3x \, \rho^{part}(x) A^2(x) \quad ,$$

del primo e secondo ordine nella costante di accoppiamento *e*. Applichiamo la teoria delle perturbazioni per dedurre lo spostamento dell'energia dal livello fondamentale: se $|\psi_0\rangle$ è lo stato fondamentale del sistema imperturbato, otteniamo

$$\delta E^{(1)} = \langle \psi_0 | H_1 | \psi_0 \rangle = 0 \quad ;$$

$$\delta E^{(2)} = \langle \psi_0 | H_2 | \psi_0 \rangle - \langle \psi_0 | H_1 \frac{\mathcal{P}}{H_0 - E_0} H_1 | \psi_0 \rangle$$

Stiamo sviluppando l'energia E dello stato fondamentale in serie di potenze di e:

$$E = E_0 + \delta E^{(1)} + \delta E^{(2)} + \dots$$

 \mathcal{P} è il proiettore sugli stati ortogonali allo stato fondamentale imperturbato $|\psi_0\rangle$. Assumiamo che l'aspettazione della corrente di particelle sullo stato fonamentale imperturbato sia nulla: questa affermazione segue automaticamente se il sistema è invariante per parità o per inversione temporale. Lo spostameno in energia al primo ordine in *e* è nullo in virtù di questa assunzione.

Riscriviamo il secondo addendo della perturbazione al secondo ordine $\delta E^{(2)}$, esplicitando il proiettore \mathcal{P} come somma sugli autostati dell'impulso:

$$-e^{2} \iint \frac{d^{3}p}{(2\pi)^{3}} \frac{d^{3}p'}{(2\pi)^{3}} A_{\alpha}(-p) A_{\beta}(-p') \langle \psi_{0} | j_{\alpha}(p) \frac{\mathcal{P}}{H_{0} - E_{0}} j_{\beta}(p') | \psi_{0} \rangle$$

$$= -e^{2} \iint \frac{d^{3}p}{(2\pi)^{3}} \frac{d^{3}p'}{(2\pi)^{3}} A_{\alpha}(-p) A_{\beta}(-p')$$

$$\cdot \sum_{\sigma} \int \frac{d^{3}k}{(2\pi)^{3}} \langle \psi_{0} | j_{\alpha}(p) | k\sigma \rangle \frac{1}{E_{k} - E_{0}} \langle k\sigma | j_{\beta}(p') | \psi_{0} \rangle \quad .$$
(6.4)

Può essere interessante, anche per gli esempi che studieremo diffusamente più avanti, elaborare ulteriormente su questa formula. Se l'hamiltoniana H_0 commuta con l'impulso, gli impulsi p, p' che compaiono nella formula 6.4 sono necessariamente uguali e opposti (nella formula è nascosta una δ di Dirac). Inoltre, siamo interessati al valore della formula per piccoli p. Nella formula compare un denominatore 1/E(p), potenzialmente singolare per $p \rightarrow 0$. Vedremo negli esempi che questa divergenza è importantissima: per sistemi di fermioni, l'unico contributo alla somma sugli impulsi viene da una regione dello spazio delle fasi estesa solo in un intorno della superficie di Fermi. Il termine che viene da H_2 , invece, riceve contributo da un integrale sull'intero volume della sfera di Fermi; una divergenza del valore di aspettazione può compensare la soppressione del primo termine dovuta allo spazio delle fasi, e rendere confrontabili i due contributi a $\delta E^{(2)}$.

Notiamo che il contributo di H_2 allo spostamento di energia al secondo ordine è sempre positivo, mentre il contributo di H_1 è negativo. Esistono argomenti di carattere generale, le disuguaglianze diamagnetiche [Simon] [Roepst.], per cui lo spostamento di energia di un sistema di particelle in campo magnetico esterno è sempre complessivamente positivo o nullo. Le particelle possono essere indifferentemente bosoni o fermioni. Uno strumento utile per affrontare questo problema è l'integrale funzionale.

6.5 Energia e corrente gauge-invariante

In questo paragrafo mostriamo finalmente la connessione fra il coefficiente di Kubo e lo spostamento dell'energia del livello fondamentale del sistema. Scriviamo la formula di Kubo, nello spazio degli impulsi: supponiamo che il sistema sia invariante per traslazioni. La corrente gauge-invariante vale

$$j(k) = eG_{Kubo}(k) A(k) \quad ,$$

la solita formula di Kubo 6.1. La formula per lo spostamento dell'energia dello stato fondamentale, al secondo ordine perturbativo, è stata derivata nel paragrafo 6.4:

$$\delta E^{(2)} = \langle \psi_0 | H_2 | \psi_0 \rangle - \langle \psi_0 | H_1 \frac{1}{H_0 - E_0} H_1 | \psi_0 \rangle$$

Questa formula può essere riscritta in termini della corrente gaugeinvariante

$$j = j^{part} + e/m A \rho^{part}$$

Indichiamo con $\langle \ldots \rangle_{(0)}$, $\langle \ldots \rangle_{(1)}$ l'aspettazione di un operatore sullo stato fondamentale "interagente" $|\psi\rangle = |\psi\rangle_0 + e|\psi\rangle_1 + \ldots$ fino all'ordine 0, 1 in *e*. In particolare

$$\langle j^{part} \rangle_{(1)} = \langle \psi_0 | j^{part} | \psi_0 \rangle + e \langle \psi_0 | j^{part} | \psi_1 \rangle + e \langle \psi_1 | j^{part} | \psi_0 \rangle$$

Osserviamo che

$$\langle \rho^{part} \rangle_{(1)} = \langle \rho^{part} \rangle_{(0)} + \mathcal{O}(e)$$

mentre l'aspettazione della corrente j^{part} sullo stato fondamentale imperturbato si annulla (per ipotesi). Calcoliamo adesso

$$\begin{split} \frac{1}{2}e \int d^3x \,\langle j(x)\rangle_{(1)} \cdot A(x) \\ &= \frac{1}{2}e \int d^3x \,\left[\langle j^{part}(x)\rangle_{(1)} \cdot A(x) + \frac{e}{m}A(x)^2 \langle \rho^{part}(x)\rangle_{(1)}\right] \\ &= \frac{1}{2}e \int d^3x \,\langle j^{part}(x)\rangle_{(1)} \cdot A(x) + \int d^3x \frac{e^2}{2m}A(x)^2 \langle \rho^{part}(x)\rangle_{(0)} + \mathcal{O}(e^3) \end{split}$$

ora, il secondo addendo si può riscrivere come

$$\int d^3x \, \frac{e^2}{2m} A(x)^2 \langle \rho^{part}(x) \rangle_0 = \langle \psi_0 | H_2 | \psi_0 \rangle$$

e il primo come

$$\begin{split} \frac{1}{2}e\int d^3x\,\langle j^{part}(x)\rangle_1\cdot A(x) &= \frac{1}{2}\langle\psi_0|H_1|\psi_1\rangle + \frac{1}{2}\langle\psi_1|H_1|\psi_0\rangle\\ &= -\langle\psi_0|H_1\frac{1}{H_0 - E_0}H_1|\psi_0\rangle \quad, \end{split}$$

(si è usata la formula $\psi_1 = -(H_0 - E_0)^{-1}H_1\psi_0$) e dunque riconosciamo che lo spostamento al secondo ordine in *e* dell'energia dello stato fondamentale vale

$$\delta E^{(2)} = \langle \psi_0 | H_2 | \psi_0 \rangle - \langle \psi_0 | H_1 \frac{1}{H_0 - E_0} H_1 | \psi_0 \rangle = \frac{1}{2} e \int d^3x \, \langle j^{g.i.}(x) \rangle_1 \cdot A(x)$$

che è la formula che si voleva dimostrare: per maggiore evidenza abbiamo chiamato $j^{g.i.}$ la corrente gauge-invariante j. Il fattore eche non è esplicitato è contenuto nell'aspettazione della corrente $j^{g.i.}$, che è di ordine 1 in e. Adesso entra in gioco la formula di Kubo: riscriviamo la formula precedente nello spazio degli impulsi

$$\delta E^{(2)} = \frac{1}{2} e \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \langle j^{g.i.}(k) \rangle_1 \cdot A(-k)$$

e usiamo la formula di Kubo

$$j^{g.i.}(k) = eG_{Kubo}(k) A(k) \quad :$$

sostituendo nella formula per $\delta E^{(2)}$, troviamo

$$\delta E^{(2)} = \frac{1}{2} e^2 \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \left[G_{Kubo}(k) \right]_{\alpha\beta} A_{\alpha}(k) A_{\beta}(-k) \quad .$$

A seguito della gauge-invarianza (paragrafo 6.2), la sola parte di G_{Kubo} che contribuisce alla formula di sopra è quella proporzionale a $\delta_{\alpha\beta}$; si vede subito che lo spostamento in energia è strettamente positivo (o nullo) per campi lentamente variabili $(k \to 0)$ se e solo se il coefficiente di Kubo è strettamente positivo (o nullo) nel limite $k \to 0$. Dato che, a seguito delle disuguaglianze diamagnetiche (paragrafo 6.4) lo spostamento in energia è sempre positivo o nullo, necessariamente anche il coefficiente di Kubo, nel limite $k \to 0$, è positivo o nullo. Inoltre, abbiamo stabilito un collegamento fra l'energia del sistema e l'effetto Meissner, ovvero la superconduttività: la densità di energia dello stato fondamentale di un sistema di materia in campo esterno cresce (strettamente) se e solo se il sistema è superconduttore.

In analogia alla discussione del paragrafo 6.3, abbiamo a nostra disposizione un secondo esempio concreto di come il solito campo magnetico localizzato sul bordo di una regione estesa, possa indurre un effetto di volume. Nella fattispecie, $G(k \rightarrow 0) > 0$ implica che la densità di energia dello stato fondamentale aumenta strettamente in ogni punto del mezzo, in conseguenza della presenza di un campo magnetico su un bordo arbitrariamente lontano. Si tratta di una ulteriore manifestazione delle correlazioni a lungo raggio presenti all'interno di un mezzo superconduttore.

6.6 Il caso relativistico

I concetti di covarianza e di condizione spettrale giocano un ruolo molto importante nel contesto di una teoria relativistica, molto più che in una teoria non relativistica. Covarianza e condizione spettrale sono gli ingredienti essenziali del calcolo che proporremo². Ci interessa ottenere, nel limite di piccoli impulsi, la parte trasversa della funzione di risposta lineare in corrente gauge-invariante a un campo elettromagnetico: solo la parte trasversa della risposta è rilevante per discutere il problema della superconduttività. Usiamo alcuni dei risultati già dimostrati nel paragrafo 5.2 per la formula di Kubo: ricordiamo che, a impulso k fissato,

$$j_{\mu}(k) = G_{\mu\nu}(k)A_{\nu}(k) \quad ,$$

²G. Morchio e F. Strocchi, non pubblicato

in cui $G_{\mu\nu}(k)$ è dato dalla somma dei due termini paramagnetico e diamagnetico: il primo contiene il commutatore corrente-corrente. Sia $k = [\omega, \vec{k}]$. Premettiamo una osservazione di carattere generale: all'ordine più basso in \vec{k} , possiamo scrivere

$$G_{ij}(\vec{k},\omega) = f(\vec{k}^2,\omega)\delta_{ij} + g(\vec{k}^2,\omega)k_ik_j/\vec{k}^2 + \dots$$

In particolare, possiamo scomporre il tensore $G_{ij}(\vec{k},\omega)$ nella somma di una parte trasversa e una parte longitudinale: la parte trasversa è caratterizzata dalla relazione

$$G_{ij}^{\perp}(\vec{k},\omega) k_j = 0$$

Ricordiamo che la parte trasversa di G è la componente rilevante per discutere l'effetto Meissner, ovvero la superconduttività (paragrafo 3.1). Il tensore trasverso G_{ii}^{\perp} può essere scritto nella forma

$$G_{ij}^{\perp}(\vec{k},\omega) = \tilde{g}(\vec{k}^2,\omega)(\delta_{ij} - k_i k_j / \vec{k}^2) \quad ;$$

osserviamo che il coefficiente $\tilde{g}(\vec{k},\omega)$ è uguale a $-g(\vec{k},\omega)$. Dunque il valore di \tilde{g} dipende soltanto dalla parte paramagnetica del tensore di risposta lineare, che contiene il commutatore corrente-corrente. Infatti il termine diamagnetico è proporzionale al tensore identità, e dunque contribuisce soltanto a $f(\vec{k},\omega)$, il coefficiente di δ_{ij} . Ricordiamo che c'è superconduttività se e solo se il coefficiente \tilde{g} è non nullo nel limite $\omega \to 0, \vec{k} \to 0$.

Studiamo dunque in maggiore dettaglio il commutatore correntecorrente, nell'ambito di una teoria relativistica; vogliamo costruire il più generale tensore

$$\mathcal{G}_{\mu\nu}(k) = \langle i[j_{\mu}(-k), j_{\nu}(k)] \rangle_0$$

Possiamo, senza perdere di generalità, considerare solo una componente di Fourier k alla volta. Per piccoli k, la covarianza impone che G sia della forma

$$\mathcal{G}_{\mu\nu}(k) = F(k^2)g_{\mu\nu} + G(k^2)k_{\mu}k_{\nu}$$

a meno di correzioni di ordine superiore al secondo in k. $g_{\mu\nu}$ è il tensore metrico, con autovalori +1 - 1 - 1 - 1. Normalmente, possiamo supporre che la corrente j sia conservata, ovvero in termini di trasformate di Fourier vale l'identità

$$k \cdot j(k) = 0$$

Attenzione al fatto che questo è vero per i sistemi elettromagnetici da noi considerati, poiché segue essenzialmente da principi primi. Tuttavia, esistono modelli, fra cui la BCS, in cui la legge di conservazione della corrente non è rigorosamente rispettata; si tratta di un punto importante, ma anche sottile. Assumiamo la conservazione della corrente. Una conseguenza immediata di questa legge di conservazione è che

$$k_{\mu}\mathcal{G}_{\mu\nu}(k) = 0$$

da cui subito

$$F(k^2) = -k^2 G(k^2)$$

ovvero

$$\mathcal{G}_{\mu\nu}(k) = G(k^2)[k_{\mu}k_{\nu} - k^2 g_{\mu\nu}] \quad .$$
(6.5)

Per argomenti di carattere generale (sfruttiamo la rappresentazione di Lehmann) il coefficiente $G(k^2)$ può essere scritto nella forma

$$G(k^2) = \int d\rho(m^2)\delta(k^2 - m^2)$$
 (6.6)

in cui ρ è una misura positiva, concentrata sullo spettro di massa del sistema quantistico considerato. Ricordiamo (paragrafo 5.2) che, per calcolare la funzione di risposta del sistema, occorre integrare nel tempo il prodotto del commutatore corrente-corrente \mathcal{G} , come funzione del tempo t, e del campo magnetico A, che però non dipende dal tempo per ipotesi, con l'aggiunta di una funzione a gradino $\theta(-t)$: il sistema è causale. Dato che il campo magnetico descritto da A non dipende dal tempo, l'integrale in t coinvolge solo il commutatore corrente-corrente e la funzione a gradino. In trasformata di Fourier, il prodotto puntuale diventa un prodotto di convoluzione fra il commutatore corrente-corrente, come funzione della frequenza ω , con la trasformata della funzione a gradino, ovvero la "funzione" $1/\omega + 2\pi i \delta(\omega)$.

Il 4-vettore k si separa in una componente temporale ω e in tre componenti spaziali \vec{k} . A noi interessa discutere il limite di \vec{k} piccoli, per $\omega = 0$: è importante che si faccia prima il limite $\omega \to 0$ e poi il limite $\vec{k} \to 0$. La motivazione fisica per la scelta dell'ordine dei due limiti è discussa nel paragrafo 3.1. Scriviamo il prodotto di convoluzione, per le sole componenti spaziali del tensore \mathcal{G} :

$$\int dt \,\theta(-t)\mathcal{G}_{ij}(\vec{k},t)$$

$$= \frac{1}{2\pi} \int d\omega' \left(\frac{1}{\omega - \omega'} + 2\pi i \delta(\omega - \omega') \right) \mathcal{G}_{ij}(\vec{k}, \omega')$$
$$= \frac{1}{2\pi} \int d\omega' \int d\rho(m^2) \left(\frac{1}{\omega - \omega'} + 2\pi i \delta(\omega - \omega') \right) (m^2 \delta_{ij} + k_i k_j)$$

Abbiamo utilizzato la rappresentazione di $G(k^2)$ in termini della misura positiva ρ e l'identità $\omega'^2 - \vec{k}^2 = m^2$ (condizione spettrale). Facciamo a questo punto due osservazioni per semplificare l'espressione di cui sopra:

- il limite ω → 0 è immediatamente visibile: possiamo semplicemente porre ω = 0 nell'espressione trovata, visto che nessuna delle altre variabili dipende implicitamente da ω;
- li contributo di 2πiδ(ω ω'), nel limite considerato, è non nullo solo per m² = 0, k = 0; dunque δ(ω') contribuisce solo se la misura ρ(m²) contiene una δ di Dirac in m² = 0. In questo caso, |k| = ω'; notiamo che il termine con δ(ω') contiene una potenza di k in più rispetto al termine con 1/ω', e dunque è trascurabile rispetto a quest'ultimo nel limite k → 0.

Osserviamo che, per quanto detto, $G_{Kubo}(\omega \rightarrow 0, \vec{k} \rightarrow 0)$ è reale. Possiamo riscrivere l'espressione trovata per $\mathcal{G}_{ij}(\vec{k})$, con il seguente cambio di variabile:

$$\delta\left(\vec{k}^{2} + m^{2} - \omega'^{2}\right) = \frac{1}{2\sqrt{\vec{k}^{2} + m^{2}}}\delta\left(\omega' - \sqrt{\vec{k}^{2} + m^{2}}\right)$$

Isoliamo nella misura $\rho(m^2)$ una δ centrata nell'origine:

$$d\rho(m^2) = \alpha \delta_0(m^2) dm^2 + d\rho'(m^2)$$

con

$$\lim_{\varepsilon \to 0^+} \int_0^\varepsilon d\rho'(m^2) = 0 \quad .$$

Il coefficiente α è nullo se lo spettro del sistema non contiene particelle a massa nulla, mentre è strettamente positivo se lo spettro contiene particelle a massa nulla. Scriviamo G_{ij} , nel limite $\vec{k} \to 0$, come somma di due termini:

$$-\frac{1}{2}\alpha \int dm^2 \delta_0(m^2) \frac{1}{\vec{k}^2 + m^2} (m^2 \delta_{ij} + k_i k_j)$$
$$-\frac{1}{2} \int d\rho'(m^2) \frac{1}{\vec{k}^2 + m^2} (m^2 \delta_{ij} + k_i k_j) \quad .$$

Consideriamo solo i termini proporzionali a $k_i k_j$:

$$G_{ij} = -\frac{1}{2}\alpha \int dm^2 \delta_0(m^2) \, \frac{k_i k_j}{\vec{k}^2 + m^2} - \frac{1}{2} \int d\rho'(m^2) \, \frac{k_i k_j}{\vec{k}^2 + m^2} + \cos t \cdot \delta_{ij} \quad .$$

Il secondo addendo è regolare e si annulla nel limite $\vec{k} \rightarrow 0$; il primo può essere integrato in m^2 , ottenendo

$$\lim_{k \to 0} \lim_{\omega \to 0} G_{ij}(\vec{k}, \omega) = -\frac{\alpha}{2} \frac{k_i k_j}{\vec{k}^2} + \cos t \cdot \delta_{ij}$$

Abbiamo ottenuto un'espressione per il coefficiente $g(\vec{k} \to 0, \omega \to 0)$. C'è (non cè) superconduttività, cioè la parte trasversa di *G*, nel limite considerato, è strettamente positiva (nulla), se e solo se il sistema contiene (non contiene) eccitazioni a massa nulla nello spettro.

Discussione del risultato

In sistemi relativistici, la condizione spettrale, insieme alla covarianza e alla conservazione della corrente elettrica, permette di ricondurre la presenza (o assenza) dell'effetto Meissner, ovvero della superconduttività, alla presenza (o assenza) nello spettro di massa del sistema di sola materia di eccitazioni (stabili) a massa nulla, la cui esistenza è manifestata dalla componente $\alpha \delta_0(m^2)$ nella misura positiva $\rho(m^2)$. Il risultato è estremamente diretto nella descrizione matematica e nell'interpretazione fisica, e oltretutto ha il pregio di essere stato ricavato sfruttando soltanto fatti di validità estremamente generale. Confrontiamo questo approccio con la teoria di Weinberg della rottura spontanea di simmetria locale. Nel corso del nostro ragionamento abbiamo utilizzato

- covarianza (relativistica);
- condizione spettrale;
- conservazione della corrente.

Questi elementi sono assunti anche nell'analisi di Weinberg, che in più sfrutta estensivamente certe restrizioni sulla forma della lagrangiana effettiva del sistema, dettate dalla (rottura spontanea della) gauge-invarianza. Queste restrizioni non sembrano necessarie per discutere la superconduttività nei sistemi relativistici, almeno limitatamente all'effetto Meissner. Tuttavia, possiamo spingerci oltre in questa discussione: abbiamo dimostrato che la superconduttività, nel senso di Kubo, è equivalente alla presenza nello spettro del sistema di modi a massa nulla, con gli stessi numeri quantici dello stato $j(k)|0\rangle$. A posteriori, possiamo supporre che i superconduttori differiscano dai normali conduttori per la rottura spontanea di una simmetria globale, che tramite il meccanismo di Goldstone (paragrafo 1.4) genera i modi a massa nulla richiesti nello spettro di materia, ovvero la $\delta_0(m^2)$ presente nella misura spettrale.

Osserviamo che la discussione della rottura di simmetria, nel contesto del procedimento di Kubo, presenta un aspetto particolarmente intrigante: i modi di Goldstone che compaiono nello spettro di materia non sono afflitti da interazioni delocalizzanti o altre "patologie" che generano goldstoni "anomali" a massa non nulla. Nell'ambito dell'analisi di Kubo la materia e il campo elettromagnetico interno sono stati in qualche maniera disaccoppiati. Se avessimo considerato la rottura di simmetria, invece che in un sistema di sola materia, in un sistema accoppiato di materia e campo elettromagnetico, come in [Gr05], avremmo plausibilmente ottenuto dei modi di Goldstone massivi, visto che l'interazione coulombiana è delocalizzante [Strocchi b]. Nel quadro proposto il manifestarsi della superconduttività equivale alla comparsa di modi (stabili) a massa nulla, cioè modi di Goldstone tipici, nello spettro della sola materia. Questo risultato sembra deporre a favore dell'interpretazione della superconduttività in termini della rottura spontanea di una simmetria globale, come ad esempio la simmetria per rotazioni di fase, analogamente a quanto accade nei sistemi di fermioni e bosoni liberi che diventano superfluidi a temperatura 0. Notiamo comunque che anche nel nostro quadro teorico la superconduttività equivale al comparire di una specie di "massa efficace" per il fotone: se combiniamo le equazioni di Maxwell $k^2 A = j$ e la formula di Kubo j = GA, otteniamo una equazione per A

$$(k^2 - G)A = 0$$

formalmente analoga all'equazione di Klein-Gordon per un fotone massivo. Il corrispondente propagatore è proporzionale a

$$\frac{1}{k^2 - G}$$

sempre nel limite di piccoli k. Quello che abbiamo appena descritto è un esempio di "generazione di massa", a seguito della rottura spontana di una simmetria. I modi di Goldstone coinvolti in questo meccanismo di generazione di massa, in questo caso dato dalla combinazione del teorema di Goldstone e del procedimento di Kubo, sono campi di materia già presenti nel sistema. Non è necessario, per generare massa tramite il meccanismo di Higgs, aggiungere al sistema un nuovo campo scalare fondamentale.

Può essere interessante cercare di capire come questa discussione possa essere estesa, almeno in una certa misura, alla trattazione di sistemi non relativistici, di cui si occupa la fisica dello stato solido: la discussione dei sistemi relativistici è infatti molto semplice e chia-ra. Purtroppo, il risultato ottenuto dipende in modo cruciale dalla condizione spettrale, la legge di dispersione $\omega^2 = \vec{k}^2 + m^2$. La potenza di questa formula diminuisce molto passando da sistemi relativistici è la disuguaglianza

$$\omega \ge 0$$
 .

Nello studio del coefficiente di Kubo trasverso, alcuni passaggi cruciali dipendevano proprio dall'uso della legge di dispersione: non è difficile convincersi del fatto che la sola disuguaglianza $\omega \ge 0$ non è sufficiente per ottenere un risultato utilizzabile.

Capitolo 7

Esempi

In questo capitolo introduciamo alcuni modelli semplici di sistemi di elettroni in campo esterno, e applichiamo il criterio di superconduttività che abbiamo introdotto. In questi modelli il coefficiente di Kubo si può calcolare esattamente, nel limite $k \rightarrow 0$; i risultati che otteniamo non sono inaspettati, ma non per questo scontati o banali, anzi. Il gas di Fermi libero è un esempio, forse un po' accademico, di sistema che a temperatura 0 ha infinita conducibilità, ma non effetto Meissner. Per comodità, lavoriamo in unità $\hbar = c = 1$.

7.1 Il gas di Fermi libero

Consideriamo N fermioni liberi, non relativistici, in un volume V; com'è noto, l'hamiltoniana del sistema è la somma delle hamiltoniane di singola particella $p^2/2m$, i cui autostati possono essere scelti nella forma onda piana per bispinore $e^{ipx} \otimes \xi$.

Lavoriamo nel formalismo di seconda quantizzazione; introduciamo i soliti operatori di creazione e distruzione a, a^{\dagger} . Per fissare le idee, $a(k,\uparrow)$ distrugge un elettrone di impulso k e spin up. A temperatura 0, lo stato fondamentale del sistema è il prodotto (antisimmetrizzato) di N stati distinti di singola particella, i cui impulsi sono tutti minori o uguali all'impulso di Fermi k_F . Le eccitazioni elementari del sistema sono le "particelle" con impulso maggiore di k_F , e le "buche" con impulso minore di k_F ; i relativi operatori di creazione e distruzione sono definiti nel modo seguente:

$$\alpha(k\uparrow) = a(k\uparrow) \qquad |k| > k_F$$

$$\beta^{\dagger}(-k\downarrow) = a(k\uparrow) \qquad |k| < k_F$$

Lo stato fondamentale del gas di Fermi è annichilato sia da $\alpha(k)$ che da $\beta(k)$.

Nel limite termodinamico $N \to \infty$, $V \to \infty$, N/V costante, questo sistema è un esempio elementare di sistema elettromagnetico esteso, a cui possiamo applicare la nostra discussione. Il modello in questione è estremamente semplice, e dunque scarsamente interessante dal punto di vista fisico; il suo pregio è che i calcoli necessari per discutere il criterio di superconduttività possono essere risolti esattamente. Dunque questo modello rudimentale può essere utile per vedere applicati gli schemi teorici del capitolo 6 a una situazione concreta, anche se non eccessivamente realistica.

L'hamiltoniana libera, in seconda quantizzazione, si scrive formalmente

$$H = \sum_{\lambda} \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \frac{k^2}{2m} a^{\dagger}(k,\lambda) a(k,\lambda)$$

Consideriamo l'operatore corrente, in trasformata di Fourier, espresso in termini degli operatori di creazione e distruzione:

$$j(q) = \sum_{\lambda} \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \frac{e}{m} \left(k + q/2\right) a^{\dagger}(k+q,\lambda)a(k,\lambda)$$

In questo paragrafo j non è la corrente gauge-invariante, ma la corrente di particelle, altrove indicata con j^{part} .

Risposta a un campo magnetico

Il sistema in questione è omogeneo, isotropo, la sua hamiltoniana non dipende esplicitamente dal tempo. Calcoliamo la corrente indotta da un campo esterno assegnato A, con la formula di Kubo; come al solito, interessiamoci al calcolo di un A indipendente dal tempo (solo campo magnetico). La corrente gauge-invariante è data dalla somma dei due contributi paramagnetico e diamagnetico

$$j^{(I)}(x) + j^{(II)}(x)$$

Osserviamo che se il sistema è omogeneo e isotropo, la sua densità (o meglio, l'aspettazione dell'operatore densità sullo stato fondamentale) è una costante, indipendente dalla posizione. In termini dell'impulso di Fermi k_F , la densità media ρ è

$$\rho = 2 \, \frac{1}{(2\pi)^3} \frac{4\pi}{3} k_F^3$$

Dunque il contributo diamagnetico alla corrente è banalmente proporzionale ad *A*:

$$j_{\alpha}^{(II)}(x) = \frac{e^2}{m} \rho A_{\alpha}(x)$$

Più delicato è il calcolo della corrente paramagnetica; è conveniente passare in trasformata di Fourier, ovvero calcolare $j^{(I)}(q)$, e scrivere anche la hamiltoniana di interazione in termini di trasformate di Fourier:

$$H^{ext} = \int d^3x \, j(x) \cdot A(x) = \int \frac{d^3q}{(2\pi)^3} \, j(q) \cdot A(-q)$$

L'applicazione diretta della formula per la risposta lineare da

$$\begin{aligned} j_{\alpha}^{(I)}(q,t) &= \int_{-\infty}^{t} dt' \langle i[j_{\alpha}(q,t), H^{ext}(t')] \rangle_{0} \\ &= \int \frac{d^{3}q'}{(2\pi)^{3}} \int_{-\infty}^{t} dt' \langle i[j_{\alpha}(q,t), j_{\beta}(q',t')] \rangle_{0} A_{\beta}(-q') \end{aligned}$$

Gli operatori sono espressi nello schema di Heisenberg; possiamo estrarre la dipendenza dal tempo, usando il fatto che lo stato fondamentale è invariante per traslazioni temporali:

$$\langle i[j_{\alpha}(q,t), j_{\beta}(q',t')] \rangle_{0} = i \langle j_{\alpha}(q)e^{iH(t-t')}j_{\beta}(q') \rangle_{0} + c.c.$$

Il calcolo di questo valore di aspettazione è reso possibile dal fatto che gli stati costruiti applicando j allo stato fondamentale sono autostati della hamiltoniana del sistema. Consideriamo

$$j(q)|0\rangle = \sum_{\lambda} \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \frac{e}{m} \left(k + q/2\right) a^{\dagger}(k+q,\lambda)a(k,\lambda)|0\rangle \quad ;$$

ci si rende conto facilmente che l'operatore j(q) connette lo stato fondamentale con uno stato fatto da una buca di impulso k e una particella di impulso k + q. Per vederlo in modo formale, scriviamo

$$a^{\dagger}(k+q) = f(k+q)\beta(-k-q) + (1 - f(k+q))\alpha^{\dagger}(k+q)$$
$$a(k) = f(k)\beta^{\dagger}(-k) + (1 - f(k))\alpha(k)$$

dove abbiamo usato la funzione f(k) uguale a 1 se $|k| < k_F$, 0 altrimenti; dunque lo stato $a^{\dagger}(k+q)a(k)|0\rangle$ è uguale a

$$f(k)(1-f(k+q))\alpha^{\dagger}(k+q)\beta^{\dagger}(-k)|0\rangle$$

che è l'unico termine a non annichilare lo stato fondamentale. L'energia di questo stato (ponendo uguale a 0 l'energia dello stato fondamentale) vale $k \cdot q/m$ al primo ordine in q. Calcoliamo il valore di aspettazione

$$\langle j_{\alpha}(q)e^{iH(t-t')}j_{\beta}(q')\rangle_{0}$$

che, per le osservazioni fatte sopra. è uguale a

$$\frac{e^2}{m^2} \sum_{\lambda\lambda'} \iint \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \frac{d^3k'}{(2\pi)^3} \left(k + \frac{q}{2}\right)_{\alpha} \left(k' + \frac{q'}{2}\right)_{\beta} e^{ik \cdot q/m (t-t')} \delta_{\lambda\lambda'}$$
$$\cdot F(k, q, k', q') \langle \beta(-k - q, \lambda) \alpha(k, \lambda) \alpha^{\dagger}(k' + q', \lambda') \beta^{\dagger}(-k', \lambda') \rangle_{0}$$

dove

$$F(k,q,k',q') = f(k')(1 - f(k'+q'))f(k+q)(1 - f(k))$$

Usando le regole di anticommutazione canoniche, possiamo calcorale l'aspettazione sul vuoto degli operatori di creazione e distruzione:

$$\langle \beta(-k-q,\lambda)\alpha(k,\lambda)\alpha^{\dagger}(k'+q',\lambda')\beta^{\dagger}(-k',\lambda')\rangle_{0}$$

= $\delta_{\lambda\lambda'}(2\pi)^{3}\delta^{3}(k+q-k')(2\pi)^{3}\delta^{3}(k'+q'-k)$

risolviamo q', k' in termini di $q \in k$ come impongono le delta di Dirac ottenute:

$$k' = k + q \qquad q' = -q$$

Sostituiamo queste equazioni nella F, e usiamo la relazione $f(k)^2 = f(k)$. Il fattore di "spazio delle fasi" F si semplifica:

$$F(k,q) = f(k+q)(1-f(k))$$

Usiamo l'integrale in k' per eliminare una δ di Dirac e sommiamo sugli spin λ , λ' : il valore di aspettazione cercato vale

$$2 \cdot 2 \frac{e^2}{m^2} \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} (2\pi)^3 \delta^3(q+q')$$
$$\cdot \left(k + \frac{q}{2}\right)_{\alpha} \left(k - \frac{q}{2}\right)_{\beta} e^{ik \cdot q/m (t-t')} f(k+q)(1-f(k))$$

Il primo fattore 2 viene dalla somma sugli spin, il secondo fattore 2 nasce dal fatto che il commutatore corrente-corrente è fatto di due pezzi, l'uno il complesso coniugato dell'altro, e nella derivazione di sopra ne abbiamo calcolato soltanto uno. Ora possiamo sostitui-re questa espressione nella formula iniziale per $j^{(I)}$, integrare nel tempo t' (supponiamo di inserire un fattore ϵ di switch-on adiabatico nell'interazione per assicurare la convergenza dell'integrale) e ottenere finalmente

$$j_{\alpha}^{(I)}(q) = -2 \cdot 2 \frac{e^2}{m^2} \iint \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \frac{d^3q'}{(2\pi)^3} (2\pi)^3 \delta^3(q+q')$$
$$\cdot \left(k + \frac{q}{2}\right)_{\alpha} \left(k - \frac{q}{2}\right)_{\beta} \frac{m}{k \cdot q} f(k+q)(1-f(k))A_{\beta}(q) \quad .$$

Abbiamo già sostituito $q' \operatorname{con} -q$ ove possibile. L'integrazione in q' elimina il fattore $\delta^3(q+q')$:

$$-2 \cdot 2 \frac{e^2}{m^2} \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \frac{m}{k \cdot q} \left(k + \frac{q}{2}\right)_{\alpha} \left(k - \frac{q}{2}\right)_{\beta} f(k)(1 - f(k+q)) A_{\beta}(q) \quad .$$

La frazione con $k \cdot q$ a denominatore viene dall'integrale nel tempo dell'esponenziale, così come il segno meno.

Per q vicino a 0, i fattori f(k+q)(1-f(k)) permettono di approssimare l'integrale di volume in k con un integrale di superficie su metà della sfera di Fermi, moltiplicata per uno spessore proporzionale a $k \cdot q$. Sviluppiamo in serie la f (nel senso delle distribuzioni):

$$f(k+q) \simeq f(k) + q \cdot \nabla f(k) = f(k) - q \cdot \frac{k}{|k|} \delta(|k| - k_F)$$
$$f(k+q)(1-f(k)) \simeq f(k)(1-f(k)) - (1-f(k))q \cdot \frac{k}{|k|} \delta(|k| - k_F)$$
$$= -q \cdot \frac{k}{k_F} \delta(|k| - k_F)$$

dato che il primo addendo si annulla identicamente; si è usato $|k| = k_F$. Scriveremo

$$\int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \cdot f(k+q)(1-f(k)) \simeq \frac{1}{(2\pi)^3} \int_{\frac{1}{2}S_F} d^2k \, \frac{k \cdot q}{k_F}$$

.

Stiamo trascurando gli ordini superiori al secondo in q. Dobbiamo valutare

$$-2 \cdot 2 \, \frac{e^2}{m^2} \frac{1}{(2\pi)^3} \int_{\frac{1}{2}S_F} d^2k \, \frac{k \cdot q}{k_F} \frac{m}{k \cdot q} \, (k)_{\alpha} \, (k)_{\beta} \, A_{\beta}(q) \quad ;$$

abbiamo approssimato anche $k + q \operatorname{con} k$ ove possibile (ci interessa il risultato all'ordine più basso in q); in forma adimensionale

$$-2 \cdot 2 \frac{1}{(2\pi)^3} k_F^3 \frac{e^2}{m} \int d\Omega \left(\frac{k_\alpha}{k_F}\right) \left(\frac{k_\beta}{k_F}\right) A_\beta(q)$$

Utilizzando l'integrale notevole

$$\int \frac{d\Omega}{4\pi} n_i n_j = \frac{1}{2} \cdot \frac{1}{3} \delta_{ij}$$

(dove abbiamo introdotto un ulteriore fattore 1/2 perché il dominio dell'integrale non è l'intera superficie di Fermi, ma solo un emisfero) si arriva facilmente al valore

$$j_{\alpha}^{(I)}(q) = -2 \cdot 2 \frac{e^2}{m} \frac{1}{2} \cdot \frac{1}{(2\pi)^3} \frac{4\pi}{3} k_F^3 \,\delta_{\alpha\beta} A_\beta(q) = -\frac{e^2}{m} \rho A_\alpha(q)$$

in cui si riconosce l'espressione per la corrente diamagnetica, a meno del segno.

In definitiva, per $q \to 0$ la corrente paramagnetica $j^{(I)}$ e la corrente diamagnetica $j^{(II)}$ sono esattamente uguali e opposte, e si cancellano identicamente: dunque, se scriviamo (Kubo) $j(q) = G(q) \cdot A(q)$, deduciamo che per $q \rightarrow 0$ anche il coefficiente G deve annullarsi, ovvero il gas di Fermi libero non è superconduttore. Notiamo che questo è un esempio (un po' accademico) di sistema fisico che non presenta effetto Meissner come lo abbiamo inteso, e comunque nel limite di temperatura 0 ha conducibilità elettrica infinita. Notiamo anche che la corrente paramagnetica riceve contributo da un integrale sulla sola superficie di Fermi, mentre la corrente diamagnetica riceve contributo da un integrale su tutto il volume della sfera di Fermi. La divergenza del fattore $1/k \cdot q$ per $q \rightarrow 0$ nel termine paramagnetico è essenziale perché alla fine del calcolo i due termini siano dello stesso ordine di grandezza, e in effetti la cancellazione che abbiamo verificato sembra essere estremamente delicata. A questo proposito, si può confrontare il risultato del gas di Fermi libero con il risultato relativo al modello BCS, discusso nel capitolo 8.

Ancora sul gas di Fermi libero

Ripetiamo brevemente la discussione della risposta a un campo magnetico esterno di un gas di Fermi libero, sfruttando stavolta la formula sullo spostamento di energia ricavata nel paragrafo 6.4: vedremo che il calcolo somiglia molto a quello già fatto, ma questo approccio è più facilmente generalizzabile. Ci aspettiamo che, come è nulla la corrente gauge-invariante nel limite di piccoli impulsi, cosi sia nullo lo spostamento in energia nello stesso limite. Lo spostamento del livello energetico fondamentale è

$$\delta E^{(2)} = e^2 \iint \frac{d^3 p}{(2\pi)^3} \frac{d^3 p'}{(2\pi)^3} A_{\alpha}(-p) A_{\beta}(-p')$$

$$\left\{ \frac{1}{2m} \rho \,\delta_{\alpha\beta}(2\pi)^3 \delta^3(p-p') - \langle j_{\alpha}(p) \frac{\mathcal{P}}{H_0 - E_0} j_{\beta}(p') \rangle_0 \right\}$$

 ρ è la densità media degli elettroni. Riscriviamo il secondo addendo in parentesi graffe, esplicitando il proiettore \mathcal{P} sugli stati ortogonali al fondamentale $|0\rangle$ in termini di autostati dell'impulso:

$$\langle j_{\alpha}(p) \frac{\mathcal{P}}{H_0 - E_0} j_{\beta}(p') \rangle_0$$
$$= \sum_{\sigma} \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \langle 0|j_{\alpha}(p)|k\sigma \rangle \frac{m}{k \cdot p} \langle k\sigma|j_{\beta}(p')|0 \rangle$$

Abbiamo sostituito $E - E_0 \operatorname{con} k \cdot p/m$, corretta al primo ordine in p. Notiamo che questo valore di aspettazione somiglia molto a quello che abbiamo già calcolato per ottenere la corrente gauge-invariante, e in effetti sappiamo che lo spostamento in energia è proporzionale alla corrente gauge-invariante (paragrafo 6.5). Non discutiamo nuovamente tutti i passaggi del calcolo, ma ci limitiamo a riportarli rapidamente. In termini di operatori di creazione e distruzione (di particella/buca),

$$\langle j_{\alpha}(p) \frac{\mathcal{P}}{H_0 - E_0} j_{\beta}(p') \rangle_0$$

= $\frac{e^2}{m^2} \sum_{\lambda\lambda'} \iint \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \frac{d^3k'}{(2\pi)^3} (k + p/2)_{\alpha} (k' + p'/2)_{\beta} \frac{m}{k \cdot p}$
 $F(k, p, k', p') \langle \beta(-k - p, \lambda) \alpha(k, \lambda) \alpha^{\dagger}(k' + p', \lambda') \beta^{\dagger}(-k', \lambda') \rangle_0$

dove

$$F(k, p, k', p') = f(k')(1 - f(k' + p'))f(k + p)(1 - f(k))$$

Ricordiamo che ci interessa l'ordine più basso non banale per $p,p'\to 0$. Il valore di aspettazione sullo stato fondamentale degli operatori di creazione e distruzione vale

$$\delta_{\lambda\lambda'} (2\pi)^3 \delta^3 (k+p-k') (2\pi)^3 \delta^3 (k'+p'-k)$$

$$= \delta_{\lambda\lambda'} (2\pi)^3 \delta^3 (k+p-k') (2\pi)^3 \delta^3 (p+p')$$

Usando i vincoli delle funzioni δ

$$k' = k + p \qquad p' = -p$$

semplifichiamo la funzione F:

$$F(k,p) = f(k+p)(1-f(k))$$

Lo spostamento in energia vale

$$\delta E^{(2)} = e^2 \iint \frac{d^3 p}{(2\pi)^3} \frac{d^3 p'}{(2\pi)^3} A_\alpha(-p) A_\beta(-p') (2\pi)^3 \delta^3(p+p')$$

$$\cdot \left\{ \frac{1}{2m} \rho \,\delta_{\alpha\beta} - \frac{1}{m^2} \int \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} \,(k+p/2)_\alpha (k-p/2)_\beta \frac{m}{k \cdot p} f(k+p) (1-f(k)) \right\} \,.$$

Abbiamo già integrato in k', ora integriamo in p'. Sfruttiamo l'equazione, ricavata nel paragrafo precedente,

$$\int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} k_{\alpha} k_{\beta} \frac{1}{k \cdot p} f(k+p)(1-f(k)) = \frac{1}{2} \rho \delta_{\alpha\beta}$$

valida nel limite $p \rightarrow 0$. Da questa,

$$\delta E^{(2)} = e^2 \iint \frac{d^3 p}{(2\pi)^3} A_{\alpha}(-p) A_{\beta}(p) \cdot \left\{ \frac{1}{2m} \rho \,\delta_{\alpha\beta} - \frac{1}{2m} \,\rho \,\delta_{\alpha\beta} \right\} = 0$$

Di nuovo, lo spostamento di energia paramagnetico cancella esattamente lo spostamento diamagnetico nel limite $p \rightarrow 0$.

7.2 Il gas di Fermi in approssimazione Hartree-Fock

Discutiamo come l'analisi precedente per il gas di Fermi libero si possa estendere a un sistema di elettroni interagenti in approssimazione Hartree-Fock, in potenziale periodico. Questa è la migliore approssimazione a elettroni indipendenti per un sistema di elettroni in un reticolo cristallino. Vedremo che, come nel gas di Fermi libero, non c'è superconduttività; la discussione è resa appena più complicata dalla periodicità discreta del sistema, che sostituisce l'omogeneità.

L'approssimazione Hartree-Fock

Discutiamo le proprietà generali del gas di Fermi interagente, nella approssimazione di Hartree-Fock; si tratta di un argomento standard (per una discussione elementare si veda ad esempio [Ashcroft] [Giuliani]). Richiamiamo molto schematicamente i principi di questa approssimazione.

Aggiungiamo a un sistema di elettroni liberi, con hamiltoniana H_0 , la repulsione coulombiana:

$$H = H_0 + V, \quad V = \frac{1}{2} \iint d^3x d^3y \,\psi^{\dagger}(x)\psi(x) \frac{e^2}{|x-y|} \psi^{\dagger}(y)\psi(y)$$

Euristicamente, approssimiamo l'interazione elettrone-elettrone con l'interazione fra un singolo elettrone e il campo medio generato dalla distribuzione di carica di tutti gli altri. Le funzioni d'onda degli elettroni saranno le soluzioni di una equazione di Schroedinger per un singolo elettrone, nel potenziale efficace V_{HF} [Ashcroft]. Naturalmente, la forma delle funzioni d'onda definisce la distribuzione di carica e quindi la forma di V_{HF} : le funzioni d'onda e V_{HF} devono essere determinati in modo autoconsistente.

Possiamo senza difficoltà aggiungere ad H un potenziale periodico, di singola particella (il potenziale del reticolo cristallino); per ragioni di simmetria, anche il campo medio degli elettroni sarà periodico, esattamente come il potenziale del reticolo [Ashcroft].

Le funzioni d'onda di singola particella hanno energia ε ben definita. Il sistema è invariante per traslazioni discrete: gli autostati sono caratterizzati da un quasi-impulso k e un indice di banda n^1 [Ashcroft]. È ben definito il concetto di energia di Fermi ε_F ; possiamo costruire la superficie di Fermi come la superficie nello spazio degli impulsi k definita dall'equazione $\varepsilon(k, n) = \varepsilon_F$ (non necessariamente una sfera). Il formalismo di particelle e buche del paragrafo 7.1 può essere introdotto senza alcuna modificazione sostanziale [Giuliani].

Kubo in sistemi periodici

Finora abbiamo discusso la formula di Kubo 6.1 in sistemi omogenei. Nel paragrafo successivo vogliamo trattare un sistema periodico, quindi dobbiamo premettere alcune precisazioni.

¹il quasi-impulso è definito a meno di un vettore del reticolo cristallino reciproco

;

La formula di Kubo per sistemi generici si scrive (6.1):

$$\langle j^{g.i.}_{\alpha}(x) \rangle^{(1)} = \int d^3x' \, G_{\alpha\beta}(x,x') \, A_{\beta}(x')$$

In sistemi omogenei, G è funzione della sola differenza x - x', dunque possiamo passare in trasformata di Fourier e definire G(q), che compare nella discussione dell'effetto Meissner (paragrafo 3.1). In sistemi periodici, sia

$$G(q,q') = \int d^3x d^3x' G(x,x') e^{iqx} e^{-iq'x'}$$

questa quantità è invariante per $x \mapsto x + a, x' \mapsto x' + a$, per qualsiasi vettore a del reticolo cristallino. Questo implica che la fase $e^{i(q-q')a}$ acquistata da G(q,q') è uguale a 1, ovvero q - q' è un vettore del reticolo cristallino reciproco (non necessariamente 0). In generale, se $\{g_n\}$ è l'insieme dei vettori del reticolo reciproco,

$$G(q,q') = \sum_{n} \mathcal{G}^n(q)(2\pi)^3 \delta^3(q-q'-g_n)$$

Sostituiamo questa espressione nella formula di Kubo, scritta in trasformata di Fourier:

$$\langle j_{\alpha}^{g.i.}(q) \rangle^{(1)} = \int \frac{d^3q'}{(2\pi)^3} G_{\alpha\beta}(q,q') A_{\beta}(q')$$
$$= \sum_n \mathcal{G}_{\alpha\beta}^n(q) A_{\beta}(q+g_n) \quad .$$

Per discutere la superconduttività ci interessa il valore di $\langle j_{\alpha}^{g.i.}(q) \rangle^{(1)}$ per $q \to 0$, indotto da un campo *A* lentamente variabile: A(q) è a supporto in un intorno di q = 0. Quindi, il solo termine che contribuisce alla formula di Kubo nel nostro caso è

$$\langle j^{g.i.}_{\alpha}(q) \rangle^{(1)} = \mathcal{G}^0_{\alpha\beta}(q) A_{\beta}(q) \quad .$$
(7.1)

Per la discussione della superconduttività in sistemi periodici occorre isolare la componente $\mathcal{G}^0(q)$ di G, e poi discutere il limite $q \to 0$ analogamente ai sistemi omogenei, usando la formula 7.1.

Risposta a un campo magnetico

Discutiamo la risposta di un sistema di elettroni interagenti, in approssimazione di Hartree-Fock, in un potenziale periodico (il reticolo

cristallino), a un campo magnetico lentamente variabile. Ricordiamo che il sistema approssimato è un insieme di elettroni indipendenti; gli autostati della hamiltoniana sono caratterizzati da un'energia $\varepsilon(k, n)$, in cui k è lo pseudo-impulso e n l'indice di banda. Assegnata la densità di elettroni, a temperatura 0 questi riempiono le bande partendo dai livelli che hanno energia più bassa, fino all'energia di Fermi ε_F . Scriviamo la hamiltoniana del sistema in termini di operatori di creazione e distruzione associati ai modi $\varepsilon(k, n)$:

$$H = \sum_{n} \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \varepsilon(k) a^{\dagger}(k,n) a(k,n)$$

.

L'integrale sugli pseudo-impulsi k è esteso alla prima zona di Brillouin [Ashcroft]. Sia $\{\varphi_{nk}(x)\}$ l'insieme delle funzioni d'onda associate ai modi $\varepsilon(n, k)$; le φ soddisfano

$$\varphi_{nk}(x+a) = \varphi_{nk}(x)e^{ika}$$

per ogni vettore a del reticolo cristallino (teorema di Bloch, [Ashcroft]). L'accoppiamento con un campo magnetico esterno A si introduce nel solito modo:

$$H \mapsto H + e \int d^3x \, j^{part}(x) \cdot A(x) + e^2/2m \, \int d^3x \, \rho^{part}(x) A^2(x) \quad ;$$

la densità e la corrente di particelle sono le stesse definite al paragrafo 7.1.

Ricordiamo un risultato ottenuto nel capitolo 6: la superconduttività è caratterizzata da una cruciale non località del coefficiente di risposta di Kubo, che si manifesta in una singolarità di questo coefficiente a piccoli impulsi. Questa non località fa si che un campo magnetico a supporto sul bordo di una regione estesa possa produrre una densità di corrente non nulla all'interno della regione (paragrafo 6.3): se il coefficiente di Kubo è regolare a piccoli impulsi, la sua trasformanta di Fourier è rapidamente decrescente nello spazio delle coordinate, e il sistema non risponde a un campo magnetico a supporto su un "bordo" asintoticamente lontano. Vedremo che nel caso studiato non ci sono contributi non regolari alla funzione di risposta per $k \rightarrow 0$, e sulla base degli argomenti generali che abbiamo richiamato concluderemo che il sistema non è superconduttore.

Discussione della divergenza a piccoli impulsi

Calcoliamo separatamente i contributi paramagnetico e diamagnetico di G, la cui espressione è data dalla formula 6.1, nel limite di piccoli impulsi. Cominciamo col calcolare il contributo paramagnetico $G^{(I)}$ della funzione di risposta di Kubo, nello spazio delle coordinate:

$$\int_{-\infty}^{0} dt \, \langle \, i[j_{\alpha}^{part}(x,0), j_{\beta}^{part}(x',t)] \rangle_{0}$$

Possiamo esplicitare la dipendenza dal tempo dell'operatore j(x',t) e integrare in t: il risultato è

$$-\langle 0|j_{\alpha}^{part}(x)\frac{\mathcal{P}}{H-E_0}j_{\beta}^{part}(x')|0\rangle - c.c.$$

introduciamo un set completo di autostati della hamiltoniana $\sum_{\ell} |\ell\rangle \langle \ell|$; sia

$$\frac{1}{\delta E(\ell)} = \langle \ell | \frac{1}{H - E_0} | \ell \rangle$$

Calcoliamo l'aspettazione

$$\langle 0|j_{\alpha}^{part}(x)|\ell\rangle = \sum_{nkn'k'} \langle 0|a_{nk}^{*}a_{n'k'}|\ell\rangle$$
$$\frac{1}{2mi} \left[\varphi_{nk}^{*}(x)\partial_{\alpha}\varphi_{n'k'}(x) - \partial_{\alpha}\varphi_{nk}^{*}(x)\varphi_{n'k'}(x)\right]$$

;

introduciamo gli operatori di creazione per particelle e buche:

$$a_{nk} = f(n,k)\alpha_{nk} + [1 - f(n,k)]\beta_{nk}^* \quad f(n,k) = \theta(\varepsilon(n,k) - \varepsilon_F) \quad ,$$

tali che

$$\alpha_{nk}|0\rangle = 0, \quad \beta_{nk}|0\rangle = 0$$

In particolare, l'aspettazione $\langle 0|a_{nk}^*a_{n'k'}|\ell\rangle$ è non nulla solo se $|\ell\rangle = \alpha_{n'k'}^*\beta_{nk}^*|0\rangle$, e in questo caso vale

$$[1 - f(n,k)]f(n',k')$$

Mettendo insieme queste informazioni possiamo calcolare, con un po' di algebra,

$$\begin{split} \langle 0|j_{\alpha}^{part}(x)\frac{\mathcal{P}}{H-E_{0}}j_{\beta}^{part}(x')|0\rangle \\ = \sum_{nkn'k'}\frac{1}{\delta E(nkn'k')}[1-f(n,k)]f(n',k') \end{split}$$

$$\cdot \frac{1}{2mi} \left[\varphi_{nk}^*(x) \partial_\alpha \varphi_{n'k'}(x) - \partial_\alpha \varphi_{nk}^*(x) \varphi_{n'k'}(x) \right]$$
$$\cdot \frac{1}{2mi} \left[\varphi_{n'k'}^*(x') \partial_\beta \varphi_{nk}(x') - \partial_\beta \varphi_{n'k'}^*(x') \varphi_{nk}(x') \right]$$

La legge di conservazione del quasi-impulso, che segue dalla invarianza per traslazioni discrete, determina la forma di $G^{(I)}(q,q')$: in particolare, valgono le uguaglianze

$$q = k' - k + g \quad q' = k' - k + g'$$

con g, g' vettori del reticolo reciproco. Ricordiamo che, nella nostra applicazione della formula di Kubo, q è l'impulso della corrente $\langle j^{g.i.} \rangle^{(1)}$ e q' è l'impulso di A: ci interessa il limite $q \to 0$, e A(q') è a supporto in un intorno di 0. Quinidi, dalle uguaglianze di cui sopra

$$q' = q + g - g' \quad ,$$

è compatibile con $q,q'\sim 0$ solo se g'=g. In questo caso le ugua-glianze diventano

$$q' = q \quad k' = k + q + g$$

con g vettore qualsiasi del reticolo reciproco.

L'espressione di G che abbiamo costruito contiene delle potenziali singolarità a piccoli q solo nel termine $1/\delta E$. Consideriamo la quantità

$$\frac{[1-f(n',k+q+g)]f(n,k)}{\delta E(n,k,n',k+q+g)}$$

L'energia $\varepsilon(n,k)$ è definita solo per k apparenenti alla prima zona di Brillouin: nell'espressione di sopra, sia k che k' appartengono alla prima zona. Osserviamo che $\varepsilon(k+g) = \varepsilon(k)$, dunque possiamo eliminare g dall'espressione di sopra. Il numeratore è non nullo solo se il modo [k,n] è una particella e il modo [k+q,n'] è una buca. Il denominatore $1/\delta E(n,k,n',k+q)$ è singolare a piccoli q solo se la particella e la buca hanno energia circa uguale e opposta; in particolare, a q = 0 dev'essere

$$\varepsilon(n,k) = |\varepsilon(n',k+0)|$$

Il numeratore vale

$$[1 - f(n', k + q)]f(n, k) = [1 - f(n', k + 0)]f(n, k)$$
$$+\delta(\varepsilon(n', k + 0) - \varepsilon_F)q \cdot \nabla \varepsilon(n', k) + \dots$$

il primo addendo è nullo se $\varepsilon(n, k) = |\varepsilon(n', k+0)|$, dunque il numeratore è sempre almeno lineare in q nella regione in cui il denominatore è singolare. In questa regione, il denominatore vale

$$\varepsilon(n', k+q) - \varepsilon(n, k) \simeq q \cdot \nabla \varepsilon(n', k)$$

a meno di ordini superiori in q, e si semplifica sempre con il numeratore, cancellando la divergenza a piccoli impulsi. L'espressione della parte paramagnetica di G che abbiamo costruito è complessivamente regolare a piccoli impulsi.

Il termine diamagnetico è manifestamente locale (~ $\langle \rho(x) \rangle \delta^3(x - x')$ nello spazio delle coordinate) e dunque regolare a piccoli impulsi.

Discussione del termine $\mathcal{G}^0(q)$

Per essere consistenti con la costruzione del paragrafo precedente, dobbiamo isolare il termine \mathcal{G}^0 all'interno del coefficiente di risposta di Kubo. Vediamo come si fa per il termine paramagnetico della risposta, che è quello più complicato. Espandiamo $G^{(I)}(x, x')$ in onde piane: se

$$\varphi_{nk}(x) = \sum_{s} c_{nk}^{(s)} e^{i(k+g_s)x} \quad ;$$

possiamo sostituire questa espressione in

$$\frac{1}{2mi} \left[\varphi_{nk}^*(x) \partial_\alpha \varphi_{n'k'}(x) - \partial_\alpha \varphi_{nk}^*(x) \varphi_{n'k'}(x) \right]$$
$$= \frac{1}{2mi} \sum_{ss'} (c_{nk}^{(s)})^* c_{n'k'}^{(s')} e^{i(k'-k+g_{s'}-g_s)x} \frac{(k+k'+g_s+g_{s'})_\alpha}{2m}$$

possiamo usare questa relazione per calcolare

$$\langle 0|j_{\alpha}^{part}(x)\frac{\mathcal{P}}{H-E_{0}}j_{\beta}^{part}(x')|0\rangle$$

$$=\sum_{nkn'k'}\sum_{ss'}\sum_{tt'}\frac{1}{\delta E(nkn'k')}[1-f(n,k)]f(n',k')$$

$$\cdot (c_{nk}^{(s)})^{*}c_{n'k'}^{(s')}(c_{n'k'}^{(t)})^{*}c_{nk}^{(t')}\frac{(k+k'+g_{s}+g_{s'})_{\alpha}}{2m}\frac{(k+k'-g_{t}-g_{t'})_{\beta}}{2m}$$

$$\cdot e^{i(k'-k+g_{s'}-g_{s})x}e^{-i(k'-k-g_{t'}+g_{t})x'}$$

Questa quantità è proporzionale alla parte paramagnetica del coefficiente di risposta:

$$G_{\alpha\beta}^{(I)}(x,x') = -\langle 0|j_{\alpha}^{part}(x)\frac{\mathcal{P}}{H-E_0}j_{\beta}^{part}(x')|0\rangle - c.c. \quad .$$

Passando in trasformata di Fourier, i fattori di fase

$$e^{i(k'-k+g_{s'}-g_s)x}e^{-i(k'-k-g_{t'}+g_t)x'}$$

diventano delle funzioni δ di Dirac:

$$(2\pi)^3 \delta^3 (k' - k + g_{s'} - g_s - q) (2\pi)^3 \delta^3 (k' - k - g_{t'} + g_t - q')$$

= $(2\pi)^3 \delta^3 (k' - k + g_{s'} - g_s - q) (2\pi)^3 \delta^3 (q - q' - g_{s'} + g_s - g_{t'} + g_t) ,$

da cui

$$\begin{aligned} G_{\alpha\beta}^{(I)}(q,q') &= -\sum_{nkn'k'} \sum_{ss'tt'} \sum_{g} \delta(g + g_{s'} - g_s + g_{t'} - g_t) \\ &\frac{1}{\delta E(nkn'k')} [1 - f(n,k)] f(n',k') (c_{nk}^{(s)})^* c_{n'k'}^{(s')} (c_{n'k'}^{(t)})^* c_{nk}^{(t')} \\ &\frac{(k+k'+g_s + g_{s'})_{\alpha}}{2m} \frac{(k+k'-g_t - g_{t'})_{\beta}}{2m} (2\pi)^3 \delta^3(k'-k+g_{s'} - g_s - q) \\ &\cdot (2\pi)^3 \delta^3(q - q' - g) - [\beta \leftrightarrow \alpha, q' \leftrightarrow q] \\ &\equiv \sum_n [\mathcal{G}_{\alpha\beta}^{(I)}]^n (q) (2\pi)^3 \delta^3(q - q' - g_n) \quad ; \end{aligned}$$

aggiungnendo il contributo della parte diamagnetica, possiamo facilmente ricostruire le espressioni per i \mathcal{G}^n . Osserviamo che la discussione della divergenza a piccoli impulsi di queste quantità è perfettamente analoga a quella che abbiamo svolto per G, e dunque non è necessario ripetere la nostra analisi. La regolarità a piccoli impulsi di \mathcal{G}^0 implica che, per gli argomenti generali che abbiamo discusso, il sistema in questione non è superconduttore.
Capitolo 8

Kubo e il modello BCS

Il BCS è un modello microscopico di straordinario successo nello spiegare molte delle caratteristiche distintive della superconduttività a basse temperature. Discutiamo la collocazione del modello BCS all'interno dell'analisi Kubo della superconduttività e il ruolo giocato in questa analisi dal *gap*.

8.1 Il modello BCS

Presentiamo molto schematicamente il modello BCS. Molti superconduttori sono sistemi di elettroni che, al di sotto di una certa temperatura critica T_c , formano una specie di condensato di coppie di Cooper, che sono stati legati di due elettroni. La hamiltoniana efficace BCS si limita essenzialmente a schematizzare questo particolare canale di condensazione [Fetter] [Mahan] [Strocchi q]. Le coppie di Cooper sono stati della forma

 $\psi_{-s}^*(-p)\psi_s^*(p)|0\rangle \quad ,$

 $\psi_s^*(p)$ crea un elettrone di impulso p e spin s. A causa della formazione di coppie di Cooper, il numero di particelle del sistema non è conservato: nella hamiltoniana dovremo includere il potenziale chimico μ del sistema. Seguiamo la derivazione della hamiltoniana BCS proposta in [Strocchi q]. Possiamo convenientemente restringere lo spazio di Hilbert ai soli stati in cui i livelli $|k, s\rangle$, $|-k, -s\rangle$ sono entrambi occupati o non occupati (quasi-spin formalism). Per maggiore chiarezza, mettiamo il sistema in volume finito V e discutiamo dopo il limite termodinamico. La hamiltoniana deve includere un potenziale efficace (attrattivo) tra gli elettroni che induca la formazione delle coppie di Cooper:

$$H_V = \sum_p \left(\frac{p^2}{2m} - \mu\right) \psi^*(p)\psi(p)$$
$$+ \frac{g}{4V} \sum_{p,q} U(p,q)\psi^*(q)\psi^*(-q)\psi(-p)\psi(p)$$

Per brevità, scriviamo soltanto gli impulsi p nelle formule, tralasciando le variabili di spin s. La funzione U è reale, U(k,p) = -U(-k,p). Questa hamiltoniana descrive l'attrazione efficace, indotta dai fononi, fra gli elettroni del sistema, al primo ordine nella costante di accoppiamento g. Le equazioni del moto corrispondenti sono:

$$i\frac{\partial}{\partial t}\psi(p,t) = \frac{p^2}{2m}\psi(p,t) + \frac{g}{2V}\sum_{q}U(p,q)\psi(-q,t)\psi(q,t)\psi^*(-p,t) \quad .$$

Definiamo

$$\Delta_V(p) = \frac{1}{2V} \sum_q U(p,q)\psi(-q)\psi(q) \quad ;$$

non è difficile verificare che $\Delta_V(x)$ commuta, nel limite $V \to \infty$, con $\psi(x)$ e $\psi^*(x)$ [Strocchi q]. Nel limite termodinamico $V \to \infty$, $\Delta \equiv \lim_{V\to\infty} \Delta_V$ è proporzionale all'identità \mathcal{I} in ogni rappresentazione irriducibile dell'algebra delle osservabili (lemma di Shur); le equazioni del moto diventano

$$i\frac{\partial}{\partial t}\psi(p,t) = \frac{p^2}{2m}\psi(p,t) + g\Delta(p)\psi^*(-p,t) \quad ,$$

ove Δ è una funzione assegnata che dipende dalla particolare rappresentazione irriducibile dell'algebra delle osservabili in cui lavoriamo. Queste equazioni del moto sono le stesse che otterremmo dalla hamiltoniana quadratica

$$H_{eff} = \int \frac{d^3p}{(2\pi)^3} \left(\frac{p^2}{2m} - \mu\right) \psi^*(p)\psi(p) + g/2 \int \frac{d^3p}{(2\pi)^3} \left(\Delta(p)\psi^*(p)\psi^*(-p) + \Delta(p)^*\psi(-p)\psi(p)\right) + cost$$

 H_{eff} è l'hamiltoniana BCS. Questa hamiltoniana si diagonalizza facilmente con una trasformazione di Bogoliubov, cioè una trasformazione canonica della forma

$$\psi(p) = u(p)\Psi(p) + v(p)\Psi^*(-p)$$

 Ψ è un campo fermionico, come ψ ; se assumiamo Δ reale, possiamo scegliere anche i coefficienti della trasformazione u, v reali [Strocchi q] [Fetter]. Per un'opportuna scelta di u, v, la hamiltoniana nelle nuove variabili è

$$H_{eff} = \int \frac{d^3p}{(2\pi)^3} E(p)\Psi^*(p)\Psi(p) + cost \quad ,$$

in cui

$$E(p) = \sqrt{\left(\frac{p^2}{2m} - \mu\right)^2 + g^2 \Delta^2(p)}$$

Non scriviamo la forma esplicita degli $u \in v$ che realizza la trasformazione: nel seguito, useremo solo il fatto che u(p) è una funzione pari e v(p) è una funzione dispari (vedi [Strocchi q]).

La funzione Δ soddisfa una equazione integrale omogenea: la cosiddetta *gap equation*. Sotto opportune ipotesi semplificatrici questa equazione può essere risolta: ammette la soluzione banale $\Delta = 0$, che corrisponde al gas di Fermi libero, ma anche alcune soluzioni non banali. Se $\Delta \neq 0$ lo spettro del sistema presenta un caratteristico *gap* di energia. Fra l'altro, la soluzione non banale per Δ ha una singolarità essenziale in g = 0, che indica il carattere altamente non perturbativo del *gap* e la causa della soppressione gerarchica della scala di energia di quest'ultimo rispetto alle normali scale di energia dei sistemi di elettroni (vedi [Strocchi q]).

Il modello BCS è una particolare approssimazione di Hartree-Fock per un sistema di elettroni interagenti; la novità essenziale rispetto alla "normale" approssimazione Hartree-Fock è la scelta dello stato di prova, tale che l'aspettazione

 $\langle \psi \psi \rangle$

è diversa da 0. Abbiamo evitato di discutere le approssimazioni e i limiti che sono coinvolti nella costruzione del BCS, che sono ampiamente dibattuti in letteratura. Ci limitiamo a fare una piccola osservazione, che ci sarà utile nel seguito: nel modello BCS non vale l'equazione di continuità per la corrente di particelle. Questo fatto fa si che il sistema di elettroni descritto dall'hamiltoniana efficace BCS si collochi in una posizione piuttosto anomala rispetto ai sistemi di elettroni discussi al capitolo 6.

8.2 Confronto con l'approccio Kubo

Ci sembra opportuno far vedere come il modello BCS possa essere discusso nei termini dell'effetto Meissner, come abbiamo fatto nel capitolo 7 per altri sistemi di elettroni. Dedichiamo al BCS uno spazio a sé stante, perché il sistema di particelle che descrive non rientra nella discussione generale del capitolo 6: l'equazione di continuità per la corrente di particelle non è soddisfatta. In particolare, non è più valida la regola di somma discussa al paragrafo 6.1, alla base della nostra discussione della superconduttività come effetto di bordo. Nonostante questo possiamo comunque discutere la superconduttività del modello BCS con l'analisi di Kubo, e apprezzare il ruolo giocato dal *gap* in questo tipo di analisi.

Per definizione, lo stato fondamentale BCS è lo stato fondamentale della H_{eff} introdotta al paragrafo 8.1: è caratterizzato dalla relazione

$$\Psi(p) \left| 0 \right\rangle_{BCS} = 0$$

Per discutere l'effetto Meissner nel modello BCS, è conveniente considerare lo spostamento in energia del livello fondamentale, causato da una perturbazione elettromagnetica. La perturbazione elettromagnetica assume la solita forma

$$H^{int} = e \int d^3x \, j^{part}(x) \cdot A(x) + \frac{e^2}{2m} \int d^3x \, \rho^{part}(x) A^2(x) \quad ,$$

 $j \in \rho$ sono definite al paragrafo 6.1. Calcoliamo la perturbazione dell'energia dello stato fondamentale BCS, al secondo ordine in e, come illustrato ai paragrafi 6.4, 6.5, nel limite in cui il campo A è lentamente variabile. Il contributo diamagnetico vale

$$\delta E^{(II)} = \frac{e^2}{2m} \int d^3x \, \langle \rho^{part}(x) \rangle_0 A^2(x) \quad ;$$

 $\langle \rho^{part}(x) \rangle_0$ è una quantità strettamente positiva; non dipende da x, poiché il sistema imperturbato è omogeneo. Il contributo diamagnetico è positivo.

Guardiamo ora al contributo paramagnetico, che vale (scrivendo l'interazione, per comodità, in trasformata di Fourier):

$$\delta E^{(I)} = -e^2 \iint \frac{d^3 p}{(2\pi)^3} \frac{d^3 p'}{(2\pi)^3} \langle j_{\alpha}^{part}(p) \frac{\mathcal{P}}{H_{eff} - E_0} j_{\beta}^{part}(p') \rangle_0 A_{\alpha}(-p) A_{\beta}(-p')$$

Scriviamo l'operatore corrente j in termini del campo Ψ :

$$j_{\alpha}^{part}(p) = \int \frac{d^{3}k}{(2\pi)^{3}} \frac{(k+p/2)_{\alpha}}{m}$$
$$\cdot [u(k+p)u(k)\Psi^{*}(k+p)\Psi(k) + u(k+p)v(k)\Psi^{*}(k+p)\Psi^{*}(-k)$$
$$+v(k+p)u(k)\Psi(-k-p)\Psi(k) + v(k+p)v(k)\Psi(-k-p)\Psi^{*}(-k)] ;$$

sostituiamo questa espressione nella formula per $\delta E^{(I)}$, e cancelliamo quei termini di j che annichilano il vuoto BCS; abbiamo

$$\delta E^{(I)} = -e^2 \int \frac{d^3p}{(2\pi)^3} \frac{d^3p'}{(2\pi)^3} \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \frac{d^3k'}{(2\pi)^3}$$

$$\cdot \frac{1}{E(k'+p') + E(-k') - E_0} \frac{(k+p/2)_{\alpha}}{m} \frac{(k'+p'/2)_{\beta}}{m}$$

$$\cdot \langle \Psi(-k-p)\Psi(k)\Psi^*(k'+p')\Psi^*(-k')\rangle_0$$

$$\cdot v(k+p)u(k)u(k'+p')v(k')A_{\alpha}(-p)A_{\beta}(-p') \quad .$$

Il valore di aspettazione $\langle \cdots \rangle_0$ si calcola facilmente con le regole di anticommutazione canoniche:

$$\langle \Psi(-k-p)\Psi(k)\Psi^*(k'+p')\Psi^*(-k')\rangle_0$$

= $(2\pi)^3\delta^3(k'+p'-k)(2\pi)^3\delta^3(k+p-k')-(2\pi)^3\delta^3(k'+p'+k+p)(2\pi)^3\delta^3(k+k')$

$$= (2\pi)^3 \delta^3 (k' + p' - k)(2\pi)^3 \delta^3 (p + p') - (2\pi)^3 \delta^3 (k' + k)(2\pi)^3 \delta^3 (p + p')$$

le funzioni δ si integrano facilmente, lasciando

•

$$\begin{split} \delta E^{(I)} &= -e^2 \int \frac{d^3 p}{(2\pi)^3} \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} \\ &\cdot \frac{1}{E(k'+p') + E(-k') - E_0} A_\alpha(-p) A_\beta(p) \\ &\cdot \left[\frac{(k+p/2)_\alpha}{m} \frac{(-k-p/2)_\beta}{m} \cdot v(k+p) u(k) u(-k-p) v(-k) \\ &- \frac{(k+p/2)_\alpha}{m} \frac{(k+p/2)_\beta}{m} \cdot v(k+p) u(k) u(k) v(k+p) \right] \quad . \end{split}$$

Abbiamo usato il fatto che E(p) è una funzione pari. Ricordiamo (paragrafo 8.1) che u(p) è pari, mentre v(p) è dispari. Esaminiamo il termine in parentesi $[\cdots]$: all'ordine 0 in p, vale

$$\frac{k_{\alpha}}{m}\frac{k_{\beta}}{m}\left((-)^{2}u(k)^{2}v(k)^{2} + (-)u(k)^{2}v(k)^{2}\right) = 0$$

e dunque è almeno lineare nell'impulso p. In forza della presenza del gap, il denominatore $1/\delta E(p)$ non è singolare in p = 0: ne deduciamo che, a differenza del caso del gas di Fermi libero (paragrafo 7.1), il contributo paramagnetico allo spostamento in energia è nullo per $p \rightarrow 0$.

Ne deduciamo che, nel modello BCS, un campo *A* lentamente variabile induce nel sistema una densità di energia positiva: il sistema è superconduttore. Notiamo che l'analisi Kubo del modello BCS è anomala: il coefficiente di Kubo non contiene, nel limite di piccoli impulsi, quel tipico termine non locale $k_{\alpha}k_{\beta}/k^2$, che caratterizza la superconduttività nei sistemi di particelle che soddisfano i requisiti generali assunti al capitolo 6.

Apparentemente, il *gap* nello spettro di un sistema di elettroni sembra essere un criterio molto potente per discutere la superconduttività: confrontiamo la discussione del BCS e del gas di Fermi libero, in termini di perturbazione del livello energetico fondamentale. Vediamo che in entrambi i sistemi il contributo diamagntico è positivo; ma, mentre per il Fermi libero il contributo paramagnetico è negativo per $p \rightarrow 0$, grazie al fatto che il termine $1/H - E_0$ diverge come 1/p, per il BCS il contributo paramagnetico è banalmente nullo, perché il termine $1/H - E_0$ vale circa Δ^{-1} . Tuttavia, questo ragionamento può essere fuorviante. Nel BCS, il gap dello spettro di energia degli elettroni costituisce un potente regolatore del contributo paramagnetico alla risposta di Kubo: ma sappiamo che, se la corrente di particelle è conservata, i sistemi superconduttori sono caratterizzati da una cruciale singolarità, a piccoli impulsi, della parte paramagnetica del coefficiente di Kubo (paragrafo 6.1). In generale, un meccanismo regolatore della parte paramagnetica del coefficiente di Kubo, quale è il gap nel modello BCS, ostacola la comparsa della superconduttività, piuttosto che favorirla. Pensiamo, ad esempio, alla discussione dei sistemi di particelle relativistici (paragrafo 6.6) in cui lo spettro delle particelle di un superconduttore è necessariamente gapless.

Capitolo 9

Sulla fondatezza dell'analisi Kubo

In questo capitolo ci occupiamo della questione, sollevata al paragrafo 5.3, della consistenza dell'insieme di prescrizioni che costituiscono l'analisi Kubo della superconduttività. Mostriamo che le formule dell'analisi Kubo possono essere derivate assumendo che lo stato fondamentale di un sistema quantistico sia un particolare stato prodotto. Successivamente, mostriamo che il procedimento di Kubo segue necessariamente se scegliamo la migliore approssimazione dello stato fondamentale all'interno di una particolare classe di stati prodotto, e calcoliamo la corrente di particelle al primo ordine nel campo elettromagnetico. Questa approssimazione è discussa all'interno di un modello semplice e confrontata con la soluzione esatta.

9.1 L'approssimazione di campo classico

Consideriamo un sistema elettromagnetico esteso, non relativistico (capitolo 2). L'algebra delle osservabili è generata da un insieme di campi φ_{α} (le particelle), di cui non specifichiamo la natura fermionica o bosonica, e dal campo A (i fotoni, o campo elettromagnetico) che d'ora in poi è considerato un vero grado di libertà del sistema, non più un parametro esterno assegnato. Il campo elettromagnetico esterna assegnata, oltre che con la materia, anche con una corrente esterna assegnata j^{ext} .

Sia *H* la hamiltoniana del sistema; è la somma della hamiltoniana di sola materia, della hamiltoniana libera del campo elettromagnetico, dell'interazione fra materia e campo elettromagnetico (minimalmente accoppiati) e dell'interazione fra il campo elettromagnetico e la corrente esterna j^{ext} :

$$H = H_0^{part} + H_0^{e.\,m.} + H^{int} + \int d^3x \, j^{ext}(x) \cdot A(x) \quad .$$

Le equazioni del moto per l'operatore campo elettromagnetico sono:

$$\frac{\partial^2 A}{\partial t^2} - \nabla^2 A = 4\pi \left(j + j^{ext} \right)$$

ove j è l'operatore corrente di particelle (gauge-invariante), j^{ext} è la corrente esterna, che è una funzione assegnata. Queste sono equazioni operatoriali esatte.

Ricordiamo brevemente l'idea fisica che sta dietro al problema di Kubo (paragrafo 5.3), che stiamo cercando di schematizzare. All'interno di un mezzo materiale facciamo passare una corrente esterna j^{ext} , stazionaria; vogliamo capire se il campo magnetico generato da j^{ext} penetra nel mezzo materiale oppure no (effetto Meissner). Matematicamente, perturbiamo il sistema di particelle e campo elettromagnetico con una corrente esterna localizzata, e studiamo la reazione del sistema a questa perturbazione.

Assumiamo (approssimazione di campo classico) che lo stato fondamentale del sistema sia uno stato prodotto di materia e campo elettromagnetico:

$$\Omega = \Omega^{part} \otimes \Omega^{e.\,m.}$$

Lo stato del campo elettromagetico è scelto coerente (vedi appendice B): sia A la funzione di coerenza. Osserviamo che la scelta di uno stato coerente per il campo elettromagnetico ha una contropartita fisica interessante: nel limite classico, a uno stato coerente del campo elettromagnetico quantistico corrisponde uno e un solo campo elettromagnetico classico (appendice B). Questo legittima l'interpretazione della funzione di coerenza A come la parte classica del campo elettromagnetico totale del sistema. Discutiamo campi magnetici statici: A è puramente spaziale e indipendente dal tempo, fatto salvo un eventuale fattore di switch-on adiabatico.

Possiamo stabilire una connessione fondamentale fra il linguaggio quantistico usato qui e il linguaggio classico usato nel paragrafo 3.1 in cui si descrive l'effetto Meissner. L'effetto Meissner, per un sistema quantistico esteso, può essere inteso come assenza (decadimento esponenziale), lontano dalla corrente esterna j^{ext} , della parte classica del campo elettromagnetico A.

Applicando la costruzione GNS [Streater] allo stato prodotto, otteniamo uno spazio di Hilbert degli stati che si scrive come prodotto tensoriale degli spazi di Hilbert di materia e campo elettromagnetico:

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}^{part} \otimes \mathcal{H}^{e.\,m.}$$

Lo stato fondamentale è rappresentato da un vettore di \mathcal{H} , anch'esso scritto come un prodotto:

$$\psi = \psi^{part} \otimes \psi^{e.\,m.}_A \quad .$$

Derivazione dell'analisi Kubo

Nel resto di questo paragrafo facciamo vedere che le equazioni dell'analisi Kubo dell'effetto Meissner si possono dedurre utilizzando le proprietà dello stato fondamentale prodotto, insieme con una opportuna approssimazione lineare. Per definizione di stato coerente,

$$\langle \hat{A}(x) \rangle_A = \langle \psi_A^{e.\,m.} | \hat{A}(x) | \psi_A^{e.\,m.} \rangle = A(x)$$

La media sullo stato fondamentale $\psi_A^{part} \otimes \psi_A^{e.m.}$ delle equazioni del moto per l'operatore \hat{A} fornisce la seguente equazione:

$$-\nabla^2 A(x) = 4\pi \left(\langle j \rangle(x) + j^{ext}(x) \right) \quad . \tag{9.1}$$

Abbiamo ottenuto un vincolo cinematico sulla funzione classica che definisce lo stato coerente: giustamente, la parte classica del campo elettromagnetico soddisfa le equazioni di Maxwell, con la corrente di particelle mediata sullo stato di materia. Osserviamo che lo stato coerente del campo elettromagnetico non evolve nel tempo: questo semplifica di molto la discussione. Infatti uno stato coerente al tempo 0 non necessariamente rimane tale al tempo t: questo è vero solo nel caso di evoluzione libera. Vale la pena di notare anche che la aspettazione della corrente di particelle gauge-invariante dipende esplicitamente dal campo elettromagnetico classico A.

Riassumendo, abbiamo calcolato la media sullo stato fondamentale approssimato delle equazioni del moto, ottenendo un vincolo per la funzione A, l'equazione 9.1; questa equazione può essere risolta per scrivere A in termini delle quantità j^{ext} , $\langle j \rangle$. Il campo A è la risposta alla corrente totale: dunque, A dev'essere interpretato come il campo totale all'interno del mezzo.

Consideriamo ora la media della hamiltoniana H sullo stato coerente del campo elettromagnetico:

$$(\psi_A^{e.\,m.}, H\psi_A^{e.\,m.}) = \sum_{\alpha} \int d^3x \, \frac{1}{2m} |(\nabla_x - ieA(x))\varphi_{\alpha}(x)|^2 + V + cost \quad ;$$

l'energia cinetica del campo elettromagnetico e l'interazione con la corrente esterna sono dei c-numeri, indipendenti dal tempo, che d'ora in poi trascuriamo. Quello che resta è l'hamiltoniana di un sistema di particelle nel campo esterno A, una mera funzione delle coordinate. Ricordiamo che A si interpreta come la parte classica del campo totale all'interno del mezzo. Nell'ambito della teoria della risposta lineare, si può determinare la risposta in corrente, al primo ordine nel campo esterno, del sistema di particelle; ovvero, calcolare la corrente gauge-invariante del sistema al primo ordine in A. Questa è la formula di Kubo vera e propria, discussa nel paragrafo 5.2. Inoltre abbiamo automaticamente soddisfatto la prescrizione dell'approccio Kubo secondo cui il campo A che compare nella formula di Kubo è il campo totale. Scriviamo l'equazione della risposta lineare:

$$\langle j(x) \rangle_{(1)}^A = \int d^3 x' G(x - x') A(x')$$
 . (9.2)

G è definito nel paragrafo 5.2. La corrente gauge-invariante ottenuta in questo modo dipende dal campo A e dalle caratteristiche "geometriche" del sistema di sole particelle, come lo stato fondamentale e la hamiltoniana.

Osserviamo che il campo A deve soddisfare un ulteriore requisito di consistenza. Sostituiamo l'espressione 9.2 nell'equazione 9.1. Quello che otteniamo è una equazione per A in cui il solo parametro libero, non fissato dalla "geometria" del sistema di sola materia, è la corrente esterna j^{ext} : in trasformata di Fourier,

$$-\frac{k^2}{4\pi}A(k) = G(k)A(k) + j^{ext}(k)$$

Possiamo usare questa equazione per discutere l'effetto Meissner in termini del G, che dipende delle proprietà della sola materia che compone il sistema.

Riassumendo:

- 1. abbiamo assunto che lo stato fondamentale del sistema fosse il prodotto di uno stato di materia e di uno stato coerente del campo elettromagnetico;
- 2. abbiamo determinato, usando le proprietà dello stato fondamentale e la teoria della risposta lineare, le formule caratteristiche dell'analisi Kubo della superconduttività.

Nel paragrafo 9.2, mostreremo che l'approssimazione di campo classico segue necessariamente dall'applicazione di un principio variazionale, coadiuvato dalla teoria della risposta lineare. Notiamo con soddisfazione che l'approssimazione di campo classico permette di evitare una fumosa discussione in termini di campi elettromagnetici "esterni" e "interni" che spesso affligge questo tipo di trattazioni.

9.2 Kubo come problema variazionale

In questo paragrafo dimostriamo che l'approssimazione di campo classico, e con questa l'analisi Kubo della superconduttività, segue da un *ansatz* variazionale, unito all'applicazione della teoria della risposta lineare. Questa discussione garantisce la fondatezza del procedimento di Kubo, discusso al paragrafo 5.3 e applicato estensivamente nei capitoli 6, 7. Speriamo anche che questa "ricostruzio-ne" aiuti a capire il senso fisico che sta dietro all'analisi Kubo della superconduttività.

Il problema fisico che ci interessa è discutere la risposta di un sistema di particelle e campo elettromagnetico alla perturbazione data da una corrente esterna fissata j^{ext} (problema di Kubo).

Dimostriamo che risolvere il problema di Kubo con l'approssimazione di campo classico, ovvero trovare il campo classico A che soddisfa i requisiti di consistenza discussi al paragrafo 9.1 (a j^{ext} fissata), equivale a risolvere il problema di minimizzare l'energia del sistema (a j^{ext} fissata) sulla classe degli stati prodotto di materia e campo elettromagnetico, approssimando la corrente si particelle con la teoria della risposta lineare.

In particolare, lo stato prodotto che risolve l'approssimazione di campo classico è il migliore stato prodotto possibile per descrivere il sistema fisico in questione: per fare meglio occorre considerare stati non fattorizzati. Sia

$$\Omega = \Omega^{part} \otimes \Omega^{e.\,m.}$$

il generico stato prodotto. Nella rappresentazione GNS associata, è rappresentato da un vettore prodotto

$$\psi^{part}\otimes\psi^{e.\,m.}\quad,\quad$$

come abbiamo visto nel paragrafo 9.1. La hamiltoniana del sistema è

$$H = \sum_{\alpha} \frac{1}{2m_{\alpha}} \int d^3x \, |\nabla\varphi_{\alpha}(x) + ie_{\alpha}\hat{A}(x)\varphi_{\alpha}(x)|^2 + V$$
$$+ \int \frac{d^3x}{8\pi} \left[(\nabla\hat{A}(x))^2 + \dot{\hat{A}}^2 \right] + \int d^3x \, j^{ext}(x) \cdot \hat{A}(x) \quad ;$$

il potenziale *V* dipende dalle coordinate e dai campi, ma non dalle derivate dei campi. La corrente j^{ext} è una funzione assegnata, a divergenza nulla. L'energia *E* del sistema, che è la quantità da minimizzare, è l'aspettazione della hamiltoniana sullo stato prodotto $\psi^{part} \otimes \psi^{e.m.}$.

Una conseguenza immediata del principio variazionale adottato è la seguente: ψ^{part} è lo stato fondamentale di $\langle \psi^{e.\,m.}|H|\psi^{e.\,m.}\rangle$, e $\psi^{e.\,m.}$ è lo stato fondamentale di $\langle \psi^{part}|H|\psi^{part}\rangle$.

Dal fatto che $\psi^{e.\,m.}$ è lo stato fondamentale di $\langle \psi^{part} | H | \psi^{part} \rangle$, segue immediatamente che lo stato $\psi^{e.\,m.}$ è coerente. Infatti, la media di H su ψ^{part} è un operatore quadratico in A, ovvero quadratico negli operatori di creazione e distruzione dei modi di A, linearmente accoppiato a una certa corrente. Lo stato fondamentale di una hamiltoniana fatta in questo modo è uno stato coerente (si veda l'appendice B); sia A la funzione di coerenza corrispondente. In definitiva, la scelta di uno stato coerente per il campo elettromagnetico non deve essere postulata, ma segue dall'*ansatz* variazionale: la scelta di uno stato coerente del campo elettromagnetico è, fra gli stati fattorizzati, la migliore approssimazione possibile per il vero stato fondamentale del sistema. Resta legittima l'interpretazione della parte classica di A come la parte classica del campo elettromagnetico totale, discussa al paragrafo 9.1.

Tenendo conto che l'hamiltoniana è normale-ordinata e lo stato $\psi^{e.\,m.}$ è coerente (talvolta scriveremo $\psi^{e.\,m.}_A$ per maggiore evidenza),

osserviamo che calcolare la media dell'hamiltoniana H su $\psi_A^{e.m.}$ equivale a sostituire l'operatore \hat{A} con il *c*-numero A. Inoltre, dato che lo stato $\psi_A^{e.m.}$ è determinato univocamente dal campo classico A, l'energia E può essere considerata una funzione di $A \in \psi^{part}$: $E = E(\psi^{part}, A)$.

La minimizzazione dell'energia rispetto a $\psi_A^{e.\,m.}$, ovvero al parametro A, equivale al fatto che A soddisfi le equazioni di Maxwell classiche, con la corrente $\langle j \rangle + j^{ext}$, ove $\langle j \rangle$ è l'aspettazione della corrente di particelle gauge-invariante. Più precisamente, questa condizione in realtà equivale al fatto che l'energia sia stazionaria, non necessariamente un minimo: dimostriamo questa affermazione.

Sappiamo che lo stato fondamentale di $\langle H \rangle_{part}$ è necessariamente uno stato coerente; tale stato minimizza il valore dell'energia, che si scrive facilmente rimpiazzando l'operatore \hat{A} in $\langle H \rangle_{part}$ con il suo valore A, definito dallo stato coerente. Scriviamo il campo elettromagnetico come $A + \delta A$; δA è una variazione infinitesima di A. Sviluppiamo in serie l'energia, rispetto al parametro δA : la stazionarietà dell'energia equivale al fatto che il coefficiente lineare in δA sia nullo. Nella fattispecie

$$\begin{split} \delta \langle H \rangle^{(1)} &= \left\langle \sum_{\alpha} \frac{ie_{\alpha}}{2m_{\alpha}} \int d^3x \left(\nabla \varphi_{\alpha}(x) + ie_{\alpha}A(x)\varphi_{\alpha}(x) \right)^* (\delta A(x))\varphi_{\alpha}(x) \right. \\ &\left. - (\delta A(x))\varphi_{\alpha}^*(x)(\nabla \varphi_{\alpha}(x) + ie_{\alpha}A(x)\varphi_{\alpha}(x)) \right. \right\rangle_{part} \\ &\left. + \int \frac{d^3x}{4\pi} \, \nabla A(x) \cdot \nabla \delta A(x) + \int d^3x \, j^{ext}(x) \cdot \delta A(x) = 0 \end{split}$$

per ogni valore di $\delta A(x)$ implica che

$$\sum_{\alpha} \frac{ie_{\alpha}}{2m_{\alpha}} \left\langle \nabla \varphi_{\alpha}^{*}(x) \varphi_{\alpha}(x) - \varphi_{\alpha}^{*}(x) \nabla \varphi_{\alpha}(x) \right\rangle_{part} + \sum_{\alpha} \frac{e_{\alpha}^{2}}{m_{\alpha}} A(x) \left\langle \varphi_{\alpha}^{*}(x) \varphi_{\alpha}(x) \right\rangle_{part} + \frac{1}{4\pi} \nabla^{2} A(x) + j^{ext}(x) = 0 \quad ;$$

in questa equazione riconosciamo l'aspettazione della corrente di particelle gauge-invariante, nel campo elettromagnetico A. Abbiamo fatto una integrazione per parti nel termine cinetico di A. Possiamo riscrivere la condizione di stazionarietà nella forma

$$\int d^3x \left\{ \langle j^{g.i.} \rangle_A + 1/4\pi \,\nabla^2 A + j^{ext} \right\} \cdot \delta A = 0 \quad ;$$

è ovvio che *A* è un punto stazionario del funzionale energia se e solo se il termine in parentesi graffe si annulla. L'equazione $\{\cdots\} = 0$ si può riscrivere nella forma significativa

$$-\nabla^2 A = 4\pi \left(\langle j^{g.i.} \rangle_A + j^{ext} \right) \quad . \tag{9.3}$$

Questa è esattamente l'equazione di Maxwell per il campo classico A, che è dunque equivalente alla stazionarietà dell'energia nella variabile $\psi_A^{e.m.}$.

La minimizzazione dell'energia rispetto al parametro ψ^{part} implica che il valore di aspettazione $\langle j^{g.i.} \rangle$ della corrente di particelle gaugeinvariante, calcolato su ψ^{part} , sia uguale al valore ottenuto tramite la formula di Kubo, al primo ordine nel campo *A*. La hamiltoniana del sistema di materia è

$$\langle \psi^{e.\,m.} | H | \psi^{e.\,m.} \rangle = \sum_{\alpha} \frac{1}{2m_{\alpha}} \int d^3x \, |\nabla\varphi_{\alpha}(x) + ie_{\alpha}A(x)\varphi_{\alpha}(x)|^2 + V \quad ;$$

scomponiamola nella somma di una parte imperturbata H_0

$$H_0 = \sum_{\alpha} \frac{1}{2m_{\alpha}} \int d^3x \, |\nabla\varphi_{\alpha}(x)|^2 + V$$

e una parte H_1 di interazione con il campo A:

$$\langle \psi^{e.\,m.} | H | \psi^{e.\,m.} \rangle \equiv H_0 + H_1$$

Possiamo scrivere ψ^{part} , lo stato fondamentale di H, in termini della hamiltoniana di interazione H_1 e dello stato fondamentale di H_0 , che chiameremo ψ_0^{part} , utilizzando l'esponenziale T-ordinato:

$$\psi^{part} = T - \exp\left(i\int_{-\infty}^{0} dt H_1(A,t)\right) \psi_0^{part}$$
$$= \left(1 + i\int_{-\infty}^{0} dt H_1(A,t) + \dots\right) \psi_0^{part} \quad .$$

La seconda riga della formula di sopra è lo sviluppo dell'esponenziale T-ordinato troncato al primo ordine in H_1 .

Per determinare la aspettazione della corrente di particelle gaugeinvariante, dobbiamo calcolare

$$\langle \psi^{part} | j^{g.i.} | \psi^{part} \rangle$$
;

utilizzando la formula dell'esponenziale T-ordinato, possiamo scrivere questa espressione in termini di una aspettazione sullo stato

fondamentale ψ_0^{part} . Se il campo *A* che compare nell'interazione è piccolo, possiamo approssimare l'espressione di $\langle j^{g.i.} \rangle$ tenendo solo i termini lineari in *A*; con questa approssimazione di risposta lineare, otteniamo proprio la formula di Kubo (paragrafo 5.2):

$$\langle j^{g.i.}_{\alpha}(x)\rangle = \int d^3x' G_{\alpha\beta}(x-x') A_{\beta}(x') \quad . \tag{9.4}$$

La quantità G è calcolata sullo stato ψ_0^{part} : dipende soltanto dalla struttura della sola materia. La stazionarietà dell'energia in ψ^{part} , insieme con l'approssimazione che la risposta della materia sia lineare in A, implica che l'aspettazione della corrente di particelle gauge-invariante $\langle j^{g.i.} \rangle$ è data dalla formula di Kubo.

Conclusioni

Nel paragrafo 9.1 abbiamo descritto un metodo per ricavare le equazioni caratteristiche dell'analisi Kubo dei superconduttori, nell'ambito di un sistema quantistico di materia e campo elettromagnetico accoppiati. Questo equazioni sono rispettivamente

- 1. le equazioni di Maxwell per il campo elettromagnetico *A*, in cui la corrente è la somma di corrente esterna e corrente di particelle media;
- 2. la formula di Kubo, che fornisce la corrente di particelle media in termini del campo *A*.

Dalle equazioni di Maxwell deduciamo che il campo *A* deve essere interpretato come il campo totale all'interno del mezzo. Abbiamo dimostrato che le stesse equazioni si possono ottenere dall'unione di un *ansatz* variazionale, la ricerca del migliore stato fondamentale fra gli stati prodotto, e della teoria della risposta lineare per il calcolo di $\langle j^{g.i.} \rangle$.

A posteriori, l'approssimazione di risposta lineare al campo A è un'approssimazione ottima per discutere i sistemi superconduttori, in cui il campo elettromagnetico è attenuato esponenzialmente allontanandosi da j^{ext} . Il punto importante, che discrimina l'applicabilità dell'approssimazione di campo classico, è la convenienza della scelta di scrivere lo stato fondamentale come uno stato prodotto: è questo il punto critico di tutta la discussione. Ci aspetteremo che questa approssimazione sia legittima per quei sistemi in cui le fluttuazioni quantistiche del campo elettromagnetico siano trascurabili: abbiamo visto che, se vogliamo approssimare lo stato del campo elettromagnetico con un campo classico, la logica variazionale sugli stati prodotto genera automaticamente la migliore approssimazione allo stato fondamentale con uno stato coerente del campo elettromagnetico. Più in generale, la scelta di uno stato prodotto sarà una buona scelta se, almeno limitatamente alla discussione delle quantità del sistema che ci interessano, come il valore medio del campo e della corrente, possiamo trascurare le correlazioni fra materia e campo elettromagnetico.

9.3 Un esempio didattico

In questa sezione vogliamo introdurre un modello rudimentale di "materia" e "campo elettromagnetico". Come vedremo, il modello è decisamente semplicissimo, per molti aspetti banale; lo includiamo soltanto a scopo didattico, per dare una realizzazione immediata e perfettamente sotto controllo dell'approssimazione di campo classico. Il modello non permette di valutare la bontà dell'approssimazione (che da come risultato la soluzione esatta), ma permette di visualizzare passo passo il procedimento descritto nei paragrafi 9.1, 9.2.

Consideriamo un sistema quantistico formato da due oscillatori armonici accoppiati. Le variabili canoniche siano q, Q e i rispettivi momenti coniugati p, P. Le variabili soddisfano le regole di commutazione canoniche. Lo spazio di Hilbert degli stati è il prodotto tensoriale degli spazi di Hilbert di singola particella. La hamiltoniana è

$$H = \frac{1}{2m}(p - eQ)^2 + \frac{1}{2}kq^2 + \frac{1}{2}\omega\left(P^2 + Q^2\right) + jQ \quad ;$$

la scelta dell'interazione nasce dall'esigenza di schematizzare nel modo più semplice possibile l'interazione di "materia", una particella di massa m e carica e in un potenziale armonico, e "campo elettromagnetico", un oscillatore armonico con pulsazione ω . La struttura dell'hamiltoniana è dettata dal meccanismo dell'accoppiamento minimale. Ci interessa studiare il caso in cui il "campo elettromagnetico" è indotto da una "corrente esterna" j, dunque è presente anche l'interazione del "campo elettromagnetico" Q con la "corrente esterna" j, un c-numero non nullo.

Determiniamo la soluzione esatta del problema. Facciamo una trasformazione canonica, in particolare una dilatazione, sulle variabili P, Q:

$$P \mapsto \sqrt{\frac{k}{\omega}} P \qquad Q \mapsto \sqrt{\frac{\omega}{k}} Q \quad ;$$

la hamiltoniana nelle nuove coordinate è

$$\begin{split} H &= \frac{1}{2}kq^2 + \frac{1}{2}kP^2 + \frac{1}{2m}p^2 + \frac{1}{2}\frac{\omega^2}{k}\left(1 + \frac{e^2}{m\omega}\right)Q^2 \\ &- \frac{e}{m}\sqrt{\frac{\omega}{k}}pQ + j\sqrt{\frac{\omega}{k}}Q \quad . \end{split}$$

Questa trasformazione è tecnicamente utile ma del tutto innocua dal punto di vista fisico, perché corrisponde semplicemente a riscalare in modo opportuno le unità di misura del campo elettromagnetico. Lavoriamo d'ora in poi sempre con questa hamiltoniana, per comodità: per tradurre i risultati in termini delle variabili originali è sufficiente un semplice riscalamento. Introduciamo le nuove variabili canoniche

$$\mathcal{P} = (q, P)$$
 $\mathcal{Q} = (-p, Q)$;

 $\mathcal{P} \in \mathcal{Q}$ sono 6-vettori, somma diretta di due 3-vettori. Con queste variabili possiamo scrivere l'hamiltoniana in una forma più compatta. In particolare, H è una forma quadratica:

$$H = \frac{1}{2}k \mathcal{P}_i \mathcal{P}_i + \frac{1}{2} \mathcal{Q}_i M_{i\ell} \mathcal{Q}_\ell + \mathcal{J}_i \mathcal{Q}_i \quad ;$$

la matrice M (simmetrica, definita positiva) vale

$$M = \left[\begin{array}{cc} 1/m & e/m\sqrt{\omega/k} \\ e/m\sqrt{\omega/k} & (\omega^2/k)\left(1 + e^2/m\omega\right) \end{array} \right]$$

e il vettore ${\mathcal J}$ vale

$$\mathcal{J} = (0, \sqrt{\omega/k}j)$$

M si intende formata da 4 blocchi 3×3 , e \mathcal{J} si intende formato da due blocchi 3×1 , come \mathcal{P} , \mathcal{Q} . Possiamo riscrivere questa hamiltoniana in una forma più conveniente:

$$H = \frac{1}{2}k \mathcal{P}_i \mathcal{P}_i + \frac{1}{2} \left(\mathcal{Q} + M^{-1} \mathcal{J}\right)_i M_{i\ell} (\mathcal{Q} + M^{-1} \mathcal{J})_\ell - \frac{1}{2} \mathcal{J}_i M_{i\ell}^{-1} \mathcal{J}_\ell$$

L'ultimo addendo è una costante. Non è difficile convincersi del fatto che il valore di aspettazione sullo stato fondamentale di $(Q + M^{-1}J)$ è 0:

$$\langle \mathcal{Q} + M^{-1} \mathcal{J} \rangle_0 = 0$$

da cui

$$\langle \mathcal{Q} \rangle_0 = -M^{-1} \mathcal{J}$$
 . (9.5)

Per inciso, allo stesso modo si ricava che $\langle \mathcal{P} \rangle_0 = 0$. La matrice M^{-1} vale

$$M^{-1} = \frac{mk}{\omega^2} \begin{bmatrix} (\omega^2/k) \left(1 + e^2/m\omega\right) & -e/m\sqrt{\omega/k} \\ -e/m\sqrt{\omega/k} & 1/m \end{bmatrix}$$

anch'essa naturalmente simmetrica, definita positiva. Dunque, la soluzione esatta del problema ha la struttura seguente: la corrente esterna j, accoppiata linearmente a uno solo dei due oscillatori (accoppiati "minimalmente"), induce una traslazione delle coordinate di entrambi. Lo spostamento è dato dalla formula 9.5, e nel dettaglio

$$\langle Q \rangle_0 = -\sqrt{\frac{k}{\omega}} \frac{j}{\omega} \qquad \langle p \rangle_0 = -e \frac{j}{\omega}$$

Discutiamo ora lo stesso problema nell'approssimazione di campo classico. Approssimiamo lo stato fondamentale esatto con uno stato prodotto:

$$\psi = \psi^{part} \otimes \psi^{e.\,m.}$$

L'approssimazione di campo classico consiste essenzialmente nel minimizzare la hamiltoniana su questa classe particolare di stati. Consideriamo la hamiltoniana mediata su ψ^{part} : supponiamo ψ^{part} assegnato, mentre $\psi^{e.m.}$ è incognito.

$$(\psi^{part}, H \psi^{part}) = \frac{1}{2}kP^2 + \frac{1}{2}\frac{\omega^2}{k}\left(1 + \frac{e^2}{m\omega}\right)Q^2 + j_{eff}Q$$
$$j_{eff} = \sqrt{\frac{k}{\omega}}\left(j - \frac{1}{m}(\psi^{part}, p \psi^{part})\right) \quad .$$

ove

Non è difficile convincersi del fatto che lo stato fondamentale di que-
sta hamiltoniana è lo stato fondamentale (indipendente dal tempo)
di un oscillatore armonico opportunamente traslato, dunque uno
stato coerente. Per calcolare tale spostamento, usiamo le equazioni
del moto per l'operatore
$$Q$$

$$k^{-1}\ddot{Q} = \dot{P} = -\left[\frac{\omega^2}{k}\left(1 + \frac{e^2}{m\omega}\right)Q - \frac{e}{m}\sqrt{\frac{\omega}{k}}\langle p \rangle + j\sqrt{\frac{\omega}{k}}\right]$$

Prendiamo la media di queste equazioni su uno stato coerente; sia $\tilde{Q} \equiv (\psi^{e.\,m.}, Q\,\psi^{e.\,m.})$. Si ottiene un'equazione per \tilde{Q} :

$$0 = -\left[\frac{\omega^2}{k}\left(1 + \frac{e^2}{m\omega}\right)\tilde{Q} - \frac{e}{m}\sqrt{\frac{\omega}{k}}\langle p \rangle + j\sqrt{\frac{\omega}{k}}\right] \quad .$$

Possiamo mettere questa equazione in una forma più significativa. Il campo elettromagnetico è indotto dalla corrente totale, che è la somma di corrente esterna j e corrente di particelle ep/m:

$$\sqrt{\frac{\omega}{k}}\tilde{Q} = \left(\omega + \frac{e^2}{m}\right)^{-1} \left[-j + e(\psi^{part}, \frac{p}{m}\psi^{part})\right] \quad . \tag{9.6}$$

Supposto noto $\langle p \rangle$ possiamo calcolare \tilde{Q} .

Consideriamo ora la media della hamiltoniana H sullo stato $\psi^{e.m.}$: supponiamo noto $\psi^{e.m.}$, mentre ψ^{part} è incognito.

$$(\psi^{e.\,m.}, H\,\psi^{e.\,m.}) = \frac{1}{2m}p^2 + \frac{1}{2}kq^2 - \frac{e}{m}\sqrt{\frac{\omega}{k}}(\psi^{e.\,m.}, Q\,\psi^{e.\,m.})p \quad .$$

Ricordiamo che $(\psi^{e.\,m.}, Q \psi^{e.\,m.}) = \tilde{Q}$ (che ora è assegnato, mentre prima era incognito). Calcoliamo il valore di aspettazione di p in regime di risposta lineare, seguendo l'approccio Kubo: in questo caso particolare, il risultato al prim'ordine in e coincide con quello esatto, una cosa che certamente non ci si aspetta in modelli più complicati. Usiamo la formula riportata nel paragrafo 5.1 (formula di Kubo!):

$$\langle p(t) \rangle_{(1)} = i \int_{-\infty}^{t} dt' \langle [p(t), H^{int}(t')] \rangle_{0}$$

Gli operatori, di cui si è indicata la dipendenza esplicita dal tempo, sono da considerarsi in schema di Heisenberg; in questo modello semplice, il "commutatore corrente-corrente" della funzione di risposta si può calcolare esplicitamente. Il risultato è

$$\langle p \rangle_{(1)} = e \left(\sqrt{\frac{\omega}{k}} \tilde{Q} \right) \quad .$$
 (9.7)

Il coefficiente *e* è proprio il coefficiente di Kubo che determina la corrente di particelle indotta da un campo esterno classico. Dunque, noto il "campo elettromagnetico" classico \tilde{Q} si ricava la corrente di particelle.

.

Le equazioni 9.6 e 9.7 formano un sistema accoppiato, che possiamo facilmente risolvere per determinare \tilde{Q} e $\langle p \rangle_{(1)}$ in modo autoconsistente. Le espressioni trovate sono proporzionali alla corrente esterna *j*:

$$(\psi^{e.\,m.}, Q\,\psi^{e.\,m.}) = -\sqrt{\frac{k}{\omega}}\frac{j}{\omega} \qquad (\psi^{part}, p\psi^{part})_{(1)} = -e\frac{j}{\omega}$$

Notiamo con soddisfazione che l'approccio Kubo riproduce una caratteristica strutturale della soluzione esatta che avevamo precedentemente discusso: la corrente esterna j, accoppiata al solo campo e.m., determina uno spostamento da 0 del valore di aspettazione del campo e.m. e della corrente di particelle. Confrontiamo questo spostamento con quello esatto:

$$\langle Q \rangle_0 = -\sqrt{\frac{k}{\omega}} \frac{j}{\omega} \qquad \langle p \rangle_0 = -e \frac{j}{\omega} \quad .$$

Notevolmente, in questo modello il procedimento di Kubo riproduce non solo la giusta struttura della soluzione esatta, ma coincide con questa.

Capitolo 10

Conclusioni

La formula di Kubo permette di discutere la superconduttività, limitatamente all'effetto Meissner, in modo semplice e chiaro. Applichiamo l'analisi Kubo della superconduttività in sistemi infinitamente estesi, non relativistici, di particelle e campo elettromagnetico, a temperatura 0. La discussione dell'effetto Meissner in un mezzo materiale può essere formalizzata con lo studio della funzione di risposta in corrente a un campo elettromagnetico: la formula di Kubo permette (in linea di principio) di calcolare questa funzione di risposta a partire dalla struttura microscopica del sistema di sola materia.

Il nostro approfondimento dell'analisi Kubo procede lungo due direzioni. Da una parte, discutiamo le caratteristiche generali del coefficiente di risposta di Kubo. In particolare, deduciamo una regola di somma basata sulla validità dell'equazione di continuità, per cui il coefficiente di Kubo può essere scritto come una divergenza; discutiamo le restrizioni sulla forma di questo coefficiente dettate dalla covarianza e dalla gauge-invarianza. Utilizzando questi strumenti, mostriamo che la superconduttività di un sistema di particelle consiste essenzialmente nella reazione del sistema a un campo magnetico localizzato su un "bordo" arbitrariamente lontano. Il sistema è superconduttore solo se questo "bordo" induce degli effetti di volume sull'intero sistema, in particolare una variazione della densità di corrente o della densità di energia dello stato fondamentale. In altre parole, mostriamo che in generale, senza fare riferimento ad alcun modello, i superconduttori presentano delle correlazioni a lungo raggio, che, fra l'altro, hanno una contropartita interessante nella presenza, all'interno della funzione di risposta di Kubo, di un caratteristico termine non locale, singolare nel limite di piccoli impulsi. Per sistemi relativistici, la condizione spettrale, insieme alle altre proprietà generali che abbiamo assunto, ci permette di affermare che la superconduttività è equivalente alla presenza di una δ di Dirac a supporto in $m^2 = 0$ nello spettro di massa del sottosistema di sola materia. Questa δ corrisponde a un'eccitazione (stabile) a massa nulla, ovvero un tipico modo di Goldstone; sulla base dell'analisi generale, questa δ genera automaticamente una massa del campo elettromagnetico. Discutiamo questo risultato anche in relazione all'analisi della superconduttività in termini di rottura spontanea di simmetria [Weinberg II] [Gr05].

In un secondo momento discutiamo la fondatezza e la consistenza dell'analisi Kubo della superconduttività in sistemi quantistici. Mostriamo che l'analisi Kubo segue necessariamente dalla combinazione di due approssimazioni: un *ansatz* variazionale, per cui approssimiamo lo stato fondamentale del sistema con uno stato prodotto di materia e campo elettromagnetico, e la teoria della risposta lineare, per approssimare la aspettazione della corrente di particelle al primo ordine nel campo elettromagnetico. Delle due approssimazioni, quest'ultima sembra essere facilmente controllabile e decisamente buona nei superconduttori, in cui il campo elettromagnetico è schermato e decade esponenzialmente.

La generazione di massa per le particelle a massa nulla, come i fotoni, è un fenomeno che non può essere capito perturbativamente (è vietato dalle identità di Ward); la logica variazionale che proponiamo descrive, nei sistemi superconduttori, un campo elettromagnetico la cui parte classica è massiva (effetto Meissner). Dunque, la logica variazionale che proponiamo è in grado di determinare alcune caratteristiche non perturbative estremamente interessanti dei sistemi superconduttori, come la generazione di massa del fotone.

Appendice A

Spazi di Fock

Consideriamo una singola particella quantistica, i cui stati sono descritti da raggi in un opportuno spazio di Hilbert \mathfrak{h} . Per concretezza, nel caso di una particella in \mathbb{R}^{ν} con k gradi di libertà interni, tale spazio può essere identificato con $L^2(\mathbb{R}^{\nu}) \otimes \mathbb{C}^k$. Le osservabili sono gli operatori autoaggiunti sullo spazio di Hilbert \mathfrak{h} , l'evoluzione temporale è generata da un operatore hamiltoniano (di singola particella) H_1 . Definiamo

$$\mathfrak{h}^0 = \mathbb{C} \qquad \mathfrak{h}^n = \mathfrak{h} \otimes \ldots \otimes \mathfrak{h}$$

n volte, e costruiamo

$$\mathfrak{F}=igoplus_{n=0}^{\infty}\mathfrak{h}^n$$
 .

Lo spazio \mathfrak{F} è uno spazio di Hilbert, con il prodotto scalare naturalmente ereditato da \mathfrak{h} . Un operatore autoaggiunto A su \mathfrak{h} si estende a un operatore autoaggiunto $d\Gamma(A)$ su \mathfrak{F} nel modo seguente:

$$d\Gamma(A) = \bigoplus_{n=0}^{\infty} \bigoplus_{i=1}^{n} \mathcal{I}^{(1)} \otimes \ldots \otimes A^{(i)} \otimes \ldots \otimes \mathcal{I}^{(n)} \quad ;$$

un operatore unitario U su \mathfrak{h} si estende a un operatore unitario $\Gamma(U)$ su \mathfrak{F} nel modo seguente:

$$\Gamma(U) = \bigoplus_{n=0}^{\infty} U^{(1)} \otimes \ldots \otimes U^{(n)}$$

In particolare, se $U = e^{iA}$, allora

$$\Gamma(U) = e^{i \, d\Gamma(A)}$$

da cui l'origine della notazione funtoriale adottata. Se A è un operatore (essenzialmente) autoaggiunto su \mathfrak{h} , possiamo dimostrare che $d\Gamma(A)$ è (essenzialmente) autoaggiunto su \mathfrak{F} : osserviamo che

- 1. $d\Gamma(A)$ è simmetrico, dunque chiudibile
- 2. sia *X* un sottospazio denso in \mathfrak{h} di vettori analitici per *A*; il sottospazio di \mathfrak{F} generato dalle combinazioni lineari finite dei prodotti tensoriali di vettori analitici di *X* è un sottospazio denso in \mathfrak{F} di vettori analitici per $d\Gamma(A)$

dunque $d\Gamma(A)$ è (essenzialmente) autoaggiunto, per argomenti di carattere generale. Inoltre, è immediato verificare che se U è unitario anche $\Gamma(U)$ è unitario. Esempi di operatori su \mathfrak{F} che possiamo costruire in questo modo sono l'operatore numero $N = d\Gamma(\mathcal{I})$ e l'operatore hamiltoniano libero $H = d\Gamma(H_1)$, ove H_1 è l'operatore hamiltoniano libero di singola particella su \mathfrak{h} .

Introduciamo la statistica: siano P_{\pm} i proiettori sui sottospazi totalmente simmetrici o antisimmetrici di \mathfrak{F} . In simboli, su ciascun sottospazio \mathfrak{h}^n

$$P_{+}f_{1} \otimes \ldots \otimes f_{n} = \frac{1}{n!} \sum_{\pi} f_{\pi(1)} \otimes \ldots \otimes f_{\pi(n)}$$
$$P_{-}f_{1} \otimes \ldots \otimes f_{n} = \frac{1}{n!} \sum_{\pi} \sigma(\pi) f_{\pi(1)} \otimes \ldots \otimes f_{\pi(n)}$$

ove $f_1 \dots f_n \in \mathfrak{h}$, π è una generica permutazione di n elementi, $\sigma(\pi)$ la sua parità. Gli spazi

$$\mathfrak{F}_{\pm} = P_{\pm}\mathfrak{F}$$

sono gli spazi di Fock fermionici (–) e bosonici (+), e descrivono sistemi di fermioni o bosoni identici. Possiamo introdurre gli operatori di creazione e distruzione a, a^{\dagger} a valori da \mathfrak{h}^n in $\mathfrak{h}^{n\pm 1}$:

$$a(f)f_1 \otimes f_2 \otimes \ldots \otimes f_n = (f, f_1)f_2 \otimes \ldots \otimes f_n$$
$$a^{\dagger}(f)f_1 \otimes f_2 \otimes \ldots \otimes f_n = f \otimes f_1 \otimes f_2 \otimes \ldots \otimes f_n$$

dove $f, f_1 \dots f_n \in \mathfrak{h}$, (f, f_1) è il prodotto scalare in \mathfrak{h} ; da questi, otteniamo gli operatori di creazione e distruzione bosonici e fermionici (segno – e segno +, rispettivamente)

$$a(f)_{\pm} = P_{\pm}a(f)P_{\pm} \qquad a^{\dagger}(f)_{\pm} = P_{\pm}a^{\dagger}(f)P_{\pm}$$

Si verifica con il calcolo diretto che questi operatori obbediscono alla regole di commutazione o anticommutazione canoniche, come è lecito aspettarsi: per i bosoni

$$\left[a(f), a^{\dagger}(g)\right] = i\Im\mathfrak{m}(f, g)\mathcal{I} \qquad \left[a(f), a(g)\right] = 0$$

e per i fermioni

$$\left\{a(f), a^{\dagger}(g)\right\} = \Re \mathfrak{e}(f, g)\mathcal{I} \qquad \left\{a(f), a(g)\right\} = 0$$

con $f, g \in \mathfrak{h}$.

Spesso una parte dello spazio di Hilbert di singola particella è $L^2(\mathbb{R}^{\nu})$; in tal caso possiamo introdurre gli operatori di campo

$$\varphi(x) = \sum_{i} f_i(x) \, a_i$$

ove $a_i = a(f_i)$, $\{f_i\}_{i \in \mathbb{N}}$ è una base ortonormale in $L^2(\mathbb{R}^{\nu})$. Dalle regole di commutazione canoniche per gli a, a^{\dagger} seguono immediatamente le regole di commutazione per i campi.

La hamiltoniana libera $H = d\Gamma(H_1)$ sullo spazio di Fock \mathfrak{F} è un oggetto ben definito, e si può scrivere in termini delle variabili canoniche in ciascun sottospazio a n particelle di \mathfrak{F} . Introduciamo, accanto a questa scrittura "di prima quantizzazione", una scrittura diversa di H, la versione "di seconda quantizzazione", che sfrutta gli operatori di creazione e distruzione a^{\dagger} , a. L'uso sistematico degli a per scrivere le osservabili e gli stati permette di includere la statistica in modo automatico, e riduce il calcolo di elementi di matrice a un problema essenzialmente combinatorio.

Fissiamo una base ortonormale $\{f_i\}_{i\in\mathbb{N}}$ nello spazio di Hilbert di singola particella \mathfrak{h} . Consideriamo lo spazio di Fock \mathfrak{F}_{\pm} associato a \mathfrak{h} , con gli operatori di creazione e distruzione $a_{\pm}^{\dagger}(f_i)$, $a_{\pm}(f_i)$. Nel seguito ometteremo gli indici \pm che individuano la statistica, tenendo presente che i discorsi che facciamo sono ugualmente validi per fermioni e bosoni. Indicheremo con a_i l'operatore $a(f_i)$, per brevità. Non è difficile dimostrare che gli stati

$$f_{i_1} \otimes \ldots \otimes f_{i_n} \quad n \in \mathbb{N}$$

opportunamente simmetrizzati o antisimmetrizzati, sono una base nello spazio di Fock \mathfrak{F} . Questi stati si possono scrivere nella forma

$$((n_1)!(n_2)!\ldots)^{-1/2} (a_1^{\dagger})^{n_1} (a_2^{\dagger})^{n_2} \ldots \Omega$$

.

in cui il coefficiente serve per la corretta normalizzazione e

$$\Omega \in \mathfrak{F} = (1, 0, 0 \dots) \quad .$$

 Ω è chiamato lo stato di vuoto, o lo stato fondamentale, della rappresentazione di Fock. L'osservabile $H=d\Gamma(H_1)$ si può convenientemente scrivere

$$H = H_{ij}a_i^{\dagger}a_j \quad H_{ij} = (f_i, H_1f_j)$$

che è la versione in seconda quantizzazione di H. Notiamo che l'operatore di creazione è a sinistra dell'operatore di distruzione. Osservabili interessanti, come potenziali a due particelle (tipo interazione coulombiana), si possono ancora scrivere con questo formalismo:

$$V = V_{ijk\ell} a_i^{\dagger} a_j^{\dagger} a_k a_\ell \quad V_{ijk\ell} = (f_i \otimes f_j, V_2 f_\ell \otimes f_k)$$

Naturalmente, il calcolo degli elementi di matrice o delle funzioni di Green non dipende dalla base scelta nello spazio di singola particella, anche se può essere più semplice in una base conveniente. Spesso useremo, per comodità nelle manipolazioni formali, delle basi improrie dello spazio di Hilbert, come gli "autostati dell'impulso".

Appendice B

Stati coerenti

Consideriamo un oscillatore armonico di massa 1 e pulsazione $\omega.$ La hamiltoniana è

$$H = \frac{1}{2} \left(p^2 + \omega^2 q^2 \right)$$

 $\boldsymbol{p},\,\boldsymbol{q}$ sono le coordinate canoniche, che obbediscono alle relazioni di commutazione

$$[p,q] = -i\mathcal{I}$$

Possiamo riscrivere la hamiltoniana in termini degli operatori di creazione e distruzione

$$a^{\dagger} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[\omega^{-1/2} p - i \omega^{1/2} q \right] \quad a = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[\omega^{-1/2} p + i \omega^{1/2} q \right] \quad ;$$

valgono le relazioni di commutazione

$$[a, a^{\dagger}] = \mathcal{I}$$

e l'hamiltoniana si scrive

$$H = \frac{\omega}{2} \left(a^{\dagger} a + 1 \right)$$

.

Osserviamo che a annichila lo stato fondamentale del sistema, la cui funzione d'onda è proporzionale a $\exp(-\alpha x^2/2)$. Le equazioni del moto sono

$$\dot{p} = i[H, p] = -\omega^2 q \quad \dot{q} = i[H, q] = p \quad ;$$

non è difficile verificare che queste equazioni sono soddisfatte per

$$p(t) = p\cos(\omega t) + \omega q\sin(\omega t)$$
 $q(t) = q\cos(\omega t) - \omega^{-1}p\sin(\omega t)$.

Da queste equazioni possiamo dedurre che

$$a(t) = e^{-i\omega t}a$$

Esistono vari modi per caratterizzare gli stati coerenti di un oscillatore armonico [Fetter]:

- 1. gli stati coerenti sono autostati di *a*; ciascuno di essi è caratterizzato dall'autovalore $\alpha \in \mathbb{C}$;
- 2. gli stati coerenti sono gli stati che soddisfano alla relazione di minima indeterminazione

$$\Delta p \Delta q = 1/2, \quad \Delta \mathcal{O} = \langle \mathcal{O}^2 \rangle - \langle \mathcal{O} \rangle^2$$

3. gli stati coerenti sono tali che i valori medi di p, q soddisfano alle equazioni del moto classiche per un oscillatore armonico di frequenza ω .

Nell'autovalore α dello stato coerente $|\alpha\rangle$ sono codificati i valori di aspettazione al tempo 0 di p, q. Non è difficile convincersi del fatto che uno stato coerente è lo stato fondamentale di un oscillatore armonico traslato di hamiltoniana

$$H = \frac{1}{2} \left((p - p_0)^2 + \omega^2 (q - q_0)^2 \right)$$

Come si intuisce dalle caratterizzazioni che abbiamo dato, gli stati coerenti sono in qualche senso gli stati quantistici più vicini agli stati classici dell'oscillatore armonico: in effetti, c'è una corrispondenza biunivoca fra gli stati di un oscillatore classico, caratterizzati dalla coppia di numeri reali posizione e impulso iniziali (p_0, q_0) e gli stati coerenti di un oscillatore quantistico, caratterizzati dal numero complesso α .

Il campo elettromagnetico non è altro che un insieme di infiniti oscillatori armonici. La definizione di stato coerente per il campo elettromagnetico è immediata: è il prodotto di infiniti stati coerenti, uno per ciascun modo del campo elettromagnetico. Notiamo che, nel caso classico, il campo elettromagnetico è caratterizzato da due gradi di libertà (le polarizzazioni) per ogni impulso k accessibile. Abbiamo una corrispondenza biunivoca naturale fra stati coerenti del campo elettromagnetico quantistico e campi elettromagnetici classici: allo stato coerente

$$\int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} c(k) |k, \alpha(k)\rangle$$

corrisponde il campo classico

$$A_{\mu}(x) = \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} c(k)\xi_{\mu}(k,\alpha(k))e^{ikx} \quad ;$$

 ξ è la polarizzazione del modo con vettore d'onda k, determinata dal numero complesso $\alpha(k);$ le espressioni non sono normalizzate.

Appendice C

Decomposizione spettrale

Consideriamo in dettaglio la quantità

 $\mathcal{G}_{\mu\nu}(x) = \langle i[j_{\mu}(0), j_{\nu}(x)] \rangle \quad ,$

introdotta nel paragrafo 6.6. Sia P l'operatore 4-impulso, e supponiamo che $P|0\rangle=0$, cioè lo stato fondamentale è invariante per traslazioni. Ora,

$$j_{\mu}(x) = e^{iPx} j_{\mu}(0) e^{-iPx}$$
;

sia per brevità $j_{\mu}(0) = j_{\mu}$. Allora il valore di aspettazione

$$\langle 0|j_{\mu}(0)j_{\nu}(x)|0\rangle$$

si può riscrivere come

$$\langle 0|j_{\mu} e^{iPx} j_{\nu}|0\rangle$$
 ,

e inserendo un set completo di stati, autostati di P,

$$\begin{split} \langle 0|j_{\mu}(0)j_{\nu}(x)|0\rangle &= \sum_{n} \langle 0|j_{\mu}|n\rangle \langle n|j_{\nu}|0\rangle e^{ip_{n}x} \\ &= \int \frac{d^{4}p}{(2\pi)^{4}} \sum_{n} (2\pi)^{4} \delta^{4}(p-p_{n}) \langle 0|j_{\mu}|n\rangle \langle n|j_{\nu}|0\rangle e^{ipx} \\ &= \int \frac{dm^{2}}{2\pi} \frac{d^{4}p}{(2\pi)^{4}} (2\pi) \delta(p^{2}-m^{2}) F_{\mu\nu}(p) e^{ipx} \quad , \end{split}$$

ove

$$F_{\mu\nu}(p) = \sum_{n} (2\pi)^4 \delta^4(p - p_n) \langle 0|j_{\mu}|n\rangle \langle n|j_{\nu}|0\rangle \quad .$$

Scriviamo, in virtù della covarianza, $F_{\mu\nu}(p) = f(p^2)p_{\mu}p_{\nu} + g(p^2)g_{\mu\nu}$; per la conservazione della corrente, dev'essere $p_{\mu}F_{\mu\nu}(p) = 0$, da cui

$$F_{\mu\nu}(p) = f(p^2)(p_{\mu}p_{\nu} - p^2g_{\mu\nu})$$
.

Sfruttiamo questa formula per scrivere

$$\langle 0|j_{\mu}(0)j_{\nu}(x)|0\rangle = \int \frac{dm^2}{2\pi} f(m^2) \int \frac{d^4p}{(2\pi)^4} (2\pi)\delta(p^2 - m^2)(p_{\mu}p_{\nu} - p^2g_{\mu\nu})e^{ipx}$$

Possiamo ricavare f dal valore di F_{00} :

$$f(p^2) = \frac{1}{\vec{p}^2} \sum_n (2\pi)^4 \delta^4(p - p_n) |\langle 0|j_0|n\rangle|^2$$

f è funzione di $p^2 = p_0^2 - \overline{p}^2$, anche se questo non è evidente dalla scrittura di cui sopra. Osserviamo però che f è manifestamente positiva. Vogliamo ora calcolare la funzione di Green iniziale:

$$\langle i[j_{\mu}(0), j_{\nu}(x)] \rangle = \int \frac{dm^2}{2\pi} f(m^2) \Delta^+_{\mu\nu}(m^2, x)$$

in cui

$$\Delta_{\mu\nu}^{+}(m^{2},x) = \int \frac{d^{4}p}{(2\pi)^{4}} (2\pi)\delta(p^{2}-m^{2})(p_{\mu}p_{\nu}-p^{2}g_{\mu\nu})\,i[e^{ipx}-e^{-ipx}]$$

 Δ^+ non è altro che la funzione di Green ritardata, per una particella libera di massa m. $f(m^2)$ è a supporto nello spettro di massa del sistema, visto che dipende dai p_n accessibili tramite j_0 . Il risultato richiesto nel paragrafo 6.6 si ottiene facilmente osservando che la trasformata di Fourier della funzione di Green calcolata vale

$$\mathcal{G}_{\mu\nu}(k) = \int \frac{dm^2}{2\pi} f(m^2) \Delta^+_{\mu\nu}(m^2, k)$$

e osservando che Δ_{00}^+ è positivo e contiene un fattore $(2\pi)\delta(k^2 - m^2)$. Questo permette di scrivere, in termini di una misura positiva $d\rho$, concentrata sullo spettro di massa del sistema,

$$\mathcal{G}_{\mu\nu}(k) = \int d\rho(m^2) \, (2\pi) \delta(k^2 - m^2) \left[k_{\mu} k_{\nu} - k^2 g_{\mu\nu} \right]$$

o in modo equivalente (con la notazione del paragrafo 6.6)

$$G(k^2) = \int d\rho(m^2) \, (2\pi) \delta(k^2 - m^2)$$

Bibliografia

- [Weinberg I] Steven Weinberg, *The Quantum Theory of Fields (vol. I)*, Cambridge 1996
- [Weinberg II] Steven Weinberg, *The Quantum Theory of Fields (vol. II)*, Cambridge 1996
- [Coleman] Sidney Coleman, Aspects of Symmetry, Erice lectures 1975
- [Fetter] Alexander L. Fetter, John D. Walecka *Quantum Theory of* Many Particle Systems, Dover 2003
- [Mahan] Gerald D. Mahan, *Many-particle Physics*, Plenum Press NY, 1981
- [Pines] David Pines, Philippe Nozières, Normal Fermi liquids, Benjamin inc., 1966
- [Jones] William Jones, Norman H. March Theoretical Solid State Physics, Dover 1973
- [Ashcroft] Neil W. Ashcroft, N, David Mermin Solid State Physics, Thomson Learning 1976
- [Giuliani] Gabriele Giuliani, Giovanni Vignale *Quantum Theory of the Electron Liquid* Cambridge 2005
- [Cohen] Claude Cohen-Tannoudji, Bernard Diu, Franck Laloe *Quantum Mechanics* Wiley NY 1977
- [Messiah] Albert Messiah, Quantum Mechanics, Dover 1962
- [Haag] Rudolf Haag, Local Quantum Physics, Springer 1996
- [Strocchi b] Franco Strocchi, Symmetry breaking, Springer 2005

- [Strocchi g] Franco Strocchi, General Properties of Quantum Field Theory, World Scientific 1993
- [Strocchi q] Franco Strocchi, Elements of Quantum Mechanics of Infinite Systems World Scientific 1985
- [Bratteli I] Ola Bratteli, Derek W. Robinson, Operator Algebras and Quantum Statistical Mechanics I, Springer 1981
- [Bratteli II] Ola Bratteli, Derek W. Robinson: Operator Algebras and Quantum Statistical Mechanics II, Springer 1981
- [Streater] Raymond F. Streater, Arthur S. Wightman, *PCT, Spin and Statistics, and All That* Addison-Wesley, 1980
- [Simon] Barry Simon, Functional Integration and Quantum Physics Academic Press NY 1979
- [Roepst.] Gert Roepstorff, Path Integral Approach to Quantum Physics Springer 1996
- [Sewell] Geoffrey Sewell, *Quantum Theory of Collective Phenomena* Clarendon Press, 1986
- [Gr05] M. Greiter, Is electromagnetic gauge invariance spontanously violated in superconductors? arXiv:cond-mat/0503400v1 2005
- [Ha62] Rudolf Haag, Nuovo Cim. 25, 287 (1962)
- [MS86] G. Morchio, F. Strocchi, Ann. Phys. 170, 310 (1986)
- [We86] S. Weinberg, Prog. Theor. Phys. Suppl. 86, 43 (1986)
- [Lu05] Luders et al, Phys. Rev. B72, 024545 (2005)
- [Al05] A. S. Alexandrov, Strong-coupling theory of high temperature superconductivity arXiv:cond-mat/0508769v4 2005
- [La02] Lamura et al, Granularity-induced gapless superconductivity in NbN films: evidence of thermal phase fluctuations arXiv:cond-mat/0201296v1 2002

* * *

RINGRAZIAMENTI

Questo lavoro conclude il mio cammino di studente universitario: un cammino di conoscenza, ma anche e soprattutto di maturazione personale. Ringrazio quindi tutti quelli che lungo questo cammino mi hanno accompagnato e sostenuto: i miei familiari, i miei maestri, i miei amici, la mia ragazza. Un ringraziamento particolare al mio relatore, per essermi stato di grandissimo esempio.

* * *