

Cap. 15 – Il modello BCS e le rotture spontanee di una simmetria

Hamiltoniana in assenza d'interazione; il potenziale chimico μ

In questo capitolo discuteremo la struttura matematica del modello BCS per la superconduttività secondo la trattazione di Haag [24], volta a mettere in luce i problemi connessi con le rappresentazioni inequivalenti e le rotture spontanee di una simmetria. [25]

Sia $\psi_r(\vec{x})$ il campo fermionico che descrive gli elettroni (non relativistici) in un metallo;⁽¹⁾ $r = 1, 2$ indica lo stato di spin. $\psi_r^+(\vec{x})$ crea una particella nello stato di spin r nel punto \vec{x} e $\psi_r(\vec{x})$ distrugge una particella nello stato di spin r nel punto \vec{x} . Gli operatori di campo ψ obbediscono alle regole di anticommutazione (a tempi uguali):

$$\begin{aligned}\{\psi_r(\vec{x}), \psi_s(\vec{x}')\} &= 0 \\ \{\psi_r(\vec{x}), \psi_s^+(\vec{x}')\} &= \delta_{rs} \delta(\vec{x} - \vec{x}').\end{aligned}$$

Supponiamo in primo luogo il sistema racchiuso in un volume finito V . In assenza d'interazione tra gli elettroni, si prende come Hamiltoniana

$$H(V) = H_0 - \mu N$$

con

$$\begin{aligned}H_0 &= \int \psi_r^+(\vec{x}) \left(-\frac{1}{2m} \nabla^2 \right) \psi_r(\vec{x}) d^3x \\ N &= \int \psi_r^+(\vec{x}) \psi_r(\vec{x}) d^3x.\end{aligned}$$

H_0 è l'energia cinetica; N il numero di particelle (elettroni); la costante μ è il potenziale chimico. Lo stato fondamentale di H differisce da quello di H_0 poiché in esso la densità di particelle non è nulla, e dipende da μ .

La ricerca dell'autovalore minimo di H equivale alla ricerca del minimo di H_0 sotto la condizione che N sia fissato (metodo di Lagrange). Cioè si cerca non uno stato fondamentale banale (assenza di elettroni), ma lo stato fondamentale di un gas di elettroni di densità prefissata.

Per renderci conto di ciò più da vicino, scriviamo H nello spazio degli impulsi:

$$H = H_0 - \mu N = \sum_{r, \vec{p}} a_r^+(\vec{p}) a_r(\vec{p}) \left(\frac{p^2}{2m} - \mu \right).$$

⁽¹⁾ In tutta questa trattazione i campi verranno presi a un dato tempo; ometteremo perciò t dalle formule.

Poiché $p^2/2m - \mu$ è funzione crescente di $|\vec{p}|$, è chiaro che lo stato fondamentale sarà quello in cui tutti i livelli con $|\vec{p}|$ minore di un certo \bar{p} sono occupati, quelli con $|\vec{p}| > \bar{p}$ sono vuoti (sfera di Fermi). Dobbiamo perciò calcolare il minimo di

$$\sum_{r, \vec{p}} \left(\frac{p^2}{2m} - \mu \right) = 2V \int d^3p \left(\frac{p^2}{2m} - \mu \right) = 8\pi V \left(\frac{\bar{p}^5}{10m} - \mu \frac{\bar{p}^3}{m} \right).$$

La condizione di minimo fornisce

$$\frac{\bar{p}^4}{4m} - \mu \bar{p}^2 = 0$$

e quindi

$$\bar{p} = \sqrt{2m\mu}.$$

Ne segue per N il valore

$$\frac{4}{3}\pi V (2m\mu)^{3/2}$$

e la densità N/V è

$$\frac{N}{V} = \frac{4}{3}\pi (2m\mu)^{3/2}.$$

È facile a questo punto esprimere μ e \bar{p} in funzione della densità N/V , e si può così ottenere l'espressione della densità di energia minima ε :

$$\varepsilon = \frac{3}{40} \frac{h^2}{m} \left(\frac{3}{\pi} \right)^{2/3} \left(\frac{N}{V} \right)^{5/3}.$$

L'Hamiltoniana d'interazione e le sue proprietà

Introduciamo ora nell'Hamiltoniana il termine d'interazione:

$$H_i = \frac{1}{V} \int d^3x d^3x' d^3z d^3z' \psi_1^+(\vec{x}) \psi_2^+(\vec{x} + \vec{z}) \psi_1(\vec{x}') \psi_2(\vec{x}' + \vec{z}') w(\vec{z}, \vec{z}') \quad (15-1)$$

L'Hamiltoniana totale è allora

$$K(V) = H_0 - \mu N + H_i. \quad (15-2)$$

Nella (15-1) $w(\vec{z}, \vec{z}')$ è una funzione che tende rapidamente a zero per grandi valori di $|\vec{z}|$ e $|\vec{z}'|$. Nella pratica, per un metallo ordinario, si assume che w sia diversa da zero per $|\vec{z} - \vec{z}'|$ dell'ordine di un debye ($\sim 10^{-4}$ cm).

Notiamo che l'interazione H_i :

- (i) non è locale, anzi accoppia particelle che si trovano a distanza infinita, non essendoci alcuna "attenuazione" per le variabili \vec{x} nell'integrale che definisce H_i ;

- (ii) è invariante per traslazioni;
- (iii) conserva il numero di particelle;
- (iv) è un'interazione tra coppie di elettroni con spin opposti, e quindi conserva separatamente il numero di particelle con spin in su e con spin in giù.

Convergenza di successioni di operatori; algebra di von Neumann

Convieni a questo punto ricordare alcune definizioni di carattere matematico. Data una successione di operatori limitati A_n definiti su uno spazio di Hilbert \mathcal{H} , la convergenza della successione si può definire in diversi modi:

- (1) Convergenza uniforme (o in norma):

$$A_n \Rightarrow A \quad \text{se} \quad \|A_n - A\| \rightarrow 0.$$

- (2) Convergenza forte:

$$A_n \rightarrow A \quad \text{se} \quad A_n x \rightarrow A x \quad \forall x \in \mathcal{H}.$$

- (3) Convergenza debole:

$$A_n \rightharpoonup A \quad \text{se} \quad (A_n x, y) \rightarrow (A x, y) \quad \forall x, y \in \mathcal{H}.$$

Dato uno spazio di Hilbert \mathcal{H} , dicesi W^* -algebra (o algebra di Von Neumann) un'algebra \mathcal{A} di operatori limitati definiti su \mathcal{H} , chiusa nella topologia debole; tale cioè che contenga il limite di ogni successione di operatori di \mathcal{A} debolmente convergente.

Siano ψ gli operatori di campo fermionico introdotti all'inizio; l'insieme \mathcal{S} degli operatori:

$$\mathcal{S} = \{\psi(f)\} \quad \psi(f) = \int \psi(\vec{x}) f(\vec{x}) d^3x \quad (15-3)$$

con f funzione a quadrato integrabile, genera un'algebra di Von Neumann.

È facile ad esempio verificare che gli operatori $\psi(f)$ sono limitati, cioè hanno norma finita.

$$\|\psi(f)\| = \sup_{\Phi} \frac{\|\psi(f)\Phi\|}{\|\Phi\|}, \quad \Phi \in \mathcal{H}$$

$$\frac{\|\psi(f)\Phi\|^2}{\|\Phi\|^2} = \frac{(\Phi, \psi^+(f)\psi(f)\Phi)}{(\Phi, \Phi)}.$$

Ora:

$$\begin{aligned} (\Phi, \psi^+(f)\psi(f)\Phi) &= \left(\Phi, \int d^3x d^3y f^*(\vec{x}) f(\vec{y}) \psi^+(\vec{x}) \psi(\vec{y}) \Phi \right) \\ &= - \left(\Phi, \int d^3x d^3y f^*(\vec{x}) f(\vec{y}) \psi(\vec{y}) \psi^+(\vec{x}) \Phi \right) + \\ &\qquad\qquad\qquad \left(\Phi, \int d^3x d^3y f^*(\vec{x}) f(\vec{y}) \delta(\vec{x} - \vec{y}) \Phi \right) \\ &= - \left(\Phi, \int d^3x d^3y f^*(\vec{x}) f(\vec{y}) \psi(\vec{y}) \psi^+(\vec{x}) \Phi \right) + (\Phi, \Phi) \int d^3x |f(\vec{x})|^2. \end{aligned}$$

Dunque:

$$\frac{\|\psi(f)\Phi\|^2}{\|\Phi\|^2} + \frac{\|\psi^+(f^*)\Phi\|^2}{\|\Phi\|^2} = \|f\|^2$$

ed essendo $\|\psi(f)\| = \|\psi^+(f^*)\|$, si ha $\|\psi(f)\| = \|f\|/\sqrt{2}$.

Significato del limite debole e del passaggio a un volume infinito

Torniamo ora al modello BCS e all'Hamiltoniana $K(V)$ definita attraverso le (15-1), (15-2). Noi vogliamo arrivare a una teoria matematica per questo modello, tale che i valori medi degli operatori corrispondenti alle grandezze fisiche "intensive" (quelle cioè che hanno senso in una regione finita di spazio, come la densità) non dipendano dal volume considerato.

Questo significa che gli elementi di matrice relativi alle grandezze fisiche intensive in un volume parziale V devono potersi approssimare mediante i valori medi di operatori relativi a un sistema infinitamente esteso; ciò induce allora a trattare V come sotto-volume o volume parziale di un volume di superconduttore di estensione infinita, e considerare ogni grandezza fisica solamente nel limite debole $V \rightarrow \infty$. (Il limite debole è quello fisicamente significativo, poiché si definisce in base alla convergenza di elementi di matrice.)

Si noti che la condizione che la funzione peso f nella definizione degli operatori $\psi(f)$ (15-3) sia a quadrato integrabile significa che le grandezze fisiche che possono essere misurate in un volume finito appartengono all'algebra di Von Neumann \mathcal{R} generata dalle funzioni $\psi(f)$.

Chiarito il significato di V non come volume di quantizzazione, ma come sottovolume di un volume di estensione infinita, e del limite debole per $V \rightarrow \infty$, si comprende la ragione per cui nella definizione di H_i si trova un volume V al denominatore: ciò equivale infatti a dire che nello spazio degli impulsi H_i sia indipendente dal volume V , e risponde al requisito che l'interazione fra elettroni di dato impulso non risenta di effetti di superficie.

Va ancora detto che nello sviluppo dei calcoli che seguiranno considereremo in luogo di $K(V)$ l'operatore $K(V) - cV$. La costante c verrà introdotta per ottenere autovalori finiti per K ; essa verrà determinata in modo che il valore medio sul vuoto di K risulti zero.

Lemma sulle proprietà di un operatore quasi locale pari

Dimostriamo ora un lemma:

Se $Q(\vec{x})$ è un operatore quasi-locale pari, l'espressione

$$\bar{Q} = \lim_{V \rightarrow \infty} \frac{1}{V} \int_V Q(\vec{x}) d^3x$$

commuta con tutti gli operatori di \mathcal{R} .

Un operatore quasi locale è in generale del tipo

$$Q(\vec{x}) = \int F(\vec{z}_1, \dots, \vec{z}_m; \vec{z}'_1, \dots, \vec{z}'_n) \psi^+(\vec{x} + \vec{z}_1) \cdots \psi^+(\vec{x} + \vec{z}_m) \psi(\vec{x} + \vec{z}'_1) \cdots \psi(\vec{x} + \vec{z}'_n) d^3 z_1 \cdots d^3 z'_n$$

con $F(\vec{z}, \vec{z}')$ funzione che decresce rapidamente per grandi valori di ciascun argomento.

Q è un operatore quasi-locale pari se contiene un numero totale pari di campi fermionici ψ, ψ^+ .

Dimostriamo il lemma nel caso che ci servirà nel seguito, cioè con Q del tipo

$$Q(\vec{x}) = \int F(\vec{z}_1, \vec{z}_2) \psi(\vec{x} + \vec{z}_1) \psi(\vec{x} + \vec{z}_2) d^3 z_1 d^3 z_2.$$

Per provare la tesi è sufficiente provare che \bar{Q} commuta con tutti gli elementi di \mathcal{S} .

Evidentemente \bar{Q} commuta con ogni $\psi(f)$. Calcoliamo allora

$$\begin{aligned} [\bar{Q}, \psi^+(f)] &= \lim_{V \rightarrow \infty} \frac{1}{V} \int d^3 x \int f(\vec{y}) d^3 y [Q(\vec{x}), \psi(\vec{y})] \\ &= \lim_{V \rightarrow \infty} \frac{1}{V} \int d^3 x d^3 y d^3 z_1 d^3 z_2 f(\vec{y}) F(\vec{z}_1, \vec{z}_2) \\ &\quad [\psi(\vec{x} + \vec{z}_1) \psi(\vec{x} + \vec{z}_2), \psi^+(\vec{y})]. \end{aligned}$$

Dopo alcuni passaggi, utilizzando le regole di anticommutazione per le ψ si ottiene:

$$[\bar{Q}, \psi^+(f)] = \lim_{V \rightarrow \infty} \frac{1}{V} \psi(g)$$

con

$$g(\vec{x}) = \int F(\vec{z}_1, \vec{z}_2) \{f(\vec{x} + \vec{z}_2 - \vec{z}_1) - f(\vec{x} + \vec{z}_1 - \vec{z}_2)\} d^3 z_1 d^3 z_2.$$

Si vede allora che il lemma vale tutte le volte che F è tale da rendere g a quadrato integrabile. Infatti allora $\psi(g)$ è un operatore limitato e quindi

$$\lim_{V \rightarrow \infty} \frac{1}{V} \psi(g) = 0$$

(limite *debole*). ■

Dal lemma segue che se prendiamo in considerazione esclusivamente *rappresentazioni irriducibili* della W^* -algebra \mathcal{R} , una quantità come \bar{Q} che commuta con tutti gli operatori di \mathcal{R} è rappresentata da un numero complesso.

Le rappresentazioni irriducibili di \mathcal{R} caratterizzate dalla funzione $\Delta(\vec{z})$

Riprendiamo ora l'Hamiltoniana $K(V)$:

$$K(V) = \int_V d^3x \left\{ \psi_r^+(\vec{x}) \left(-\frac{1}{2m} \nabla^2 - \mu \right) \psi_r(\vec{x}) - c \right\} + H_i(V). \quad (15-4)$$

La parte libera ammette senz'altro limite debole per $V \rightarrow \infty$: l'espressione finale è la stessa, con la differenza che l'integrale è esteso a tutto lo spazio. L'Hamiltoniana d'interazione non ha la forma (15-3), poiché contiene due integrazioni senza funzioni di attenuazione in \vec{x} e in \vec{x}' e un solo fattore $1/V$. Tuttavia il lemma precedente permette di operare notevoli semplificazioni.

Calcoliamo in primo luogo, nel limite debole, i commutatori

$$[H_i, \psi_1(\vec{y})] \quad [H_i, \psi_1^+(\vec{y})] \quad [H_i, \psi_2(\vec{y})] \quad [H_i, \psi_2^+(\vec{y})].$$

Per $[H_i, \psi_1(\vec{y})]$ si ha ad esempio:

$$\begin{aligned} [H_i, \psi_1(\vec{y})] &= \frac{1}{V} \int w(\vec{z}, \vec{z}') \psi_2^+(\vec{y} + \vec{z}) \psi_2(\vec{x}' + \vec{z}') \psi_1(\vec{x}') d^3x' d^3z d^3z' \\ &= \int \psi_2^+(\vec{y} + \vec{z}) d^3z \frac{1}{V} \int w(\vec{z}, \vec{z}') \psi_2(\vec{x}' + \vec{z}') \psi_1(\vec{x}') d^3x' d^3z'. \end{aligned}$$

L'integrale $I(\vec{z})$:

$$\begin{aligned} I(\vec{z}) &= \frac{1}{V} \int w(\vec{z}, \vec{z}') \psi_2(\vec{x}' + \vec{z}') \psi_1(\vec{x}') d^3x' d^3z' \\ &= \frac{1}{V} \int F(\vec{z}', \vec{z}'') \psi_2(\vec{x}' + \vec{z}') \psi_1(\vec{x}' + \vec{z}'') d^3x' d^3z' d^3z'' \end{aligned} \quad (15-5)$$

con $F(\vec{z}', \vec{z}'') = w(\vec{z}, \vec{z}') \delta(\vec{z}'')$, si riconduce a un'espressione del tipo Q di cui al lemma precedente, e quindi commuta con tutti gli operatori di \mathcal{R} , per ogni valore di \vec{z} . In una rappresentazione irriducibile di \mathcal{R} il limite debole dell'espressione (15-5) è allora un numero complesso dipendente da \vec{z} , cioè una funzione numerica di \vec{z} , che chiameremo $\Delta(\vec{z})$:

$$I(\vec{z}) \rightarrow \Delta(\vec{z}). \quad (15-6)$$

Il limite debole del commutatore $[H_i, \psi_1(\vec{y})]$ vale perciò, nella rappresentazione irriducibile caratterizzata da $\Delta(\vec{z})$:

$$[H_i, \psi_1(\vec{y})] \rightarrow \int \Delta(\vec{z}) \psi_2^+(\vec{y} + \vec{z}) d^3z.$$

Si può ancora verificare che l'operatore

$$H'_i = \int d^3x d^3y \Delta(\vec{z}) \psi_1^+(\vec{x}) \psi_2^+(\vec{x} + \vec{z}) + \text{h.c.} \quad (15-7)$$

ha con ψ_1 e ψ_2 le stesse regole di commutazione di H_i . In una rappresentazione irriducibile allora, al limite debole, vale

$$H_i = H'_i. \quad (15-8)$$

Per ogni rappresentazione irriducibile abbiamo cioè una funzione $\Delta(\vec{z})$ e un operatore "energia d'interazione" H'_i .

Si vede già a questo punto che H'_i è un operatore che *non* conserva il numero di particelle, diversamente da H_i . Questo perché l'operatore "numero di particelle" *non commuta* con l'operatore

$$\lim \frac{1}{V} \int w(\vec{z}, \vec{z}') \psi_2(\vec{x}' + \vec{z}') \psi_1(\vec{x}') d^3x' d^3z'$$

che in una rappresentazione irriducibile è uguale alla funzione $\Delta(\vec{z})$.

Hamiltoniana sulle rappresentazioni irriducibili di \mathcal{R} ; diagonalizzazione

Scriviamo ora H'_i nella rappresentazione degli impulsi:

$$H'_i = \int d^3x d^3y d^3q d^3q' \tilde{\Delta}(\vec{p}) a_1^+(\vec{q}) a_2^+(\vec{q}') \exp[-i\vec{p}\cdot\vec{x} + i\vec{q}\cdot\vec{y} + i\vec{q}'\cdot(\vec{x} + \vec{z})] + \text{h.c.}$$

$\tilde{\Delta}(\vec{p})$ rappresenta la trasformata di Fourier di $\Delta(\vec{z})$; a^+ sono gli operatori di creazione nello spazio degli impulsi per i campi ψ .

La precedente espressione per l'Hamiltoniana d'interazione si può evidentemente ricondurre a

$$H'_i = \int d^3p \tilde{\Delta}(\vec{p}) a_1^+(\vec{p}) a_2^+(-\vec{p}) + \text{h.c.}$$

e l'Hamiltoniana totale assume allora la forma:

$$K = \int d^3p \left(\frac{p^2}{2m} - \mu \right) [a_1^+(\vec{p}) a_1(\vec{p}) + a_2^+(\vec{p}) a_2(\vec{p})] + \left(\tilde{\Delta}(\vec{p}) a_1^+(\vec{p}) a_2^+(-\vec{p}) + \text{h.c.} \right).$$

Operiamo a questo punto una trasformazione di Bogoliubov, che conserva le regole di anticommutazione tra gli operatori di creazione e distruzione. I nuovi

operatori di creazione e distruzione b^+ e b sono legati agli a^+ , a dalle relazioni seguenti:

$$\begin{aligned} a_1(\vec{p}) &= u(\vec{p}) b_1(\vec{p}) - v^*(\vec{p}) b_2^+(-\vec{p}) \\ a_2(\vec{p}) &= v^*(-\vec{p}) b_1^+(-\vec{p}) - u(-\vec{p}) b_2(\vec{p}) \end{aligned}$$

con

$$u(\vec{p}) = \frac{\tilde{\Delta}(\vec{p})}{\left((E - \eta)^2 + |\tilde{\Delta}(\vec{p})|^2\right)^{1/2}} \quad v(\vec{p}) = \frac{E - \eta}{\left((E - \eta)^2 + |\tilde{\Delta}(\vec{p})|^2\right)^{1/2}} \quad (15-9)$$

$$E = \sqrt{\eta + |\tilde{\Delta}|^2} \quad \eta = \frac{p^2}{2m}.$$

L'Hamiltoniana totale assume allora la forma:

$$K' = \int d^3p E(\vec{p}) (b_1^+(\vec{p}) b_1(\vec{p}) + b_2^+(\vec{p}) b_2(\vec{p})). \quad (15-10)$$

La presenza del termine $|\tilde{\Delta}|^2$ nella definizione di $E(\vec{p})$ fornisce il cosiddetto "energy gap," caratteristico della teoria BCS; un esame più approfondito può mostrare che le proprietà di superconduttività sono strettamente legate a tale espressione dell'energia $E(\vec{p})$.

Partendo dall'espressione (15-10) per K' possiamo definire lo stato di vuoto, cioè lo stato fondamentale per K' :

$$b_1(\vec{p})|0\rangle = b_2(\vec{p})|0\rangle = 0.$$

(Si noti che tutte le costanti additive che sarebbero dovute comparire nella (15-10) sono state poste uguali a zero; ciò equivale a richiedere che lo stato fondamentale di K' abbia energia nulla).

Grazie all'invarianza per traslazioni di $|0\rangle$, possiamo portare avanti le conclusioni del lemma di pag. 15-4 e precisamente: in una rappresentazione irriducibile di \mathcal{R} , la media spaziale di una grandezza quasi locale pari è una costante uguale al valore medio sul vuoto di Q :

$$\bar{Q} = \langle 0|\bar{Q}|0\rangle = \lim \langle 0|\frac{1}{V} \int d^3x Q(\vec{x})|0\rangle = \frac{1}{V} \int \langle 0|Q(\vec{x})|0\rangle d^3x = \langle 0|Q(0)|0\rangle.$$

In particolare abbiamo:

$$\Delta(\vec{z}) = \langle 0|\int d^3z' w(\vec{z}, \vec{z}') \psi_2(\vec{z}') \psi_1(0)|0\rangle. \quad (15-11)$$

Ci serviremo di questa espressione per determinare le soluzioni nel nostro problema, che dipendono dalla funzione $\Delta(\vec{z})$. Sia $\tilde{\Delta}(\vec{p})$ la trasformata di Fourier della $\Delta(\vec{z})$; sfruttando la (15-11) si ha:

$$\tilde{\Delta}(\vec{p}) = \langle 0 | \int d^3 q d^3 q' \tilde{w}(\vec{p}, \vec{q}) a_2(\vec{q}) a_1(\vec{q}') | 0 \rangle$$

dove $\tilde{w}(\vec{p}, \vec{q})$ denota la trasformata di Fourier della $w(\vec{z}, \vec{z}')$. Calcolando $a_2(\vec{q}) a_1(\vec{q}')$ in termini delle b, b^+ (cfr. pag. 15-7), sfruttando la definizione di vuoto e le regole di anticommutazione per gli operatori b^+, b si trova

$$\langle 0 | a_2(\vec{q}) a_1(\vec{q}') | 0 \rangle = -u(-\vec{q}) v^*(\vec{q}') \delta(\vec{q} + \vec{q}')$$

e quindi

$$\tilde{\Delta}(\vec{p}) = - \int d^3 q \tilde{w}(\vec{p}, \vec{q}) v^*(\vec{q}) u(\vec{q}). \quad (15-12)$$

Diverse soluzioni del problema e loro interpretazione fisica

Inserendo in quest'ultima espressione i valori di $u(\vec{p}), v(\vec{p})$ forniti dalle (15-7), otteniamo un'equazione integrale che determina Δ . Si può dimostrare che per un'adatta scelta della funzione $w(\vec{z}, \vec{z}')$ (corrispondente al potenziale d'interazione) le soluzioni sono di due tipi:

- (i) soluzione nulla $\Delta = 0$; ad essa corrisponde il vuoto $|\overline{0}\rangle$ e lo spazio di Hilbert $\overline{\mathcal{H}}$, ottenuto applicando \mathcal{R} a $|\overline{0}\rangle$
- (ii) un'infinità continua di soluzioni, dipendente dal parametro α nel modo seguente:

$$\Delta_\alpha(\vec{z}) = e^{i\alpha} \Delta_0(\vec{z}) \quad 0 \leq \alpha \leq 2\pi$$

con Δ_0 funzione reale. A ciascuna di queste soluzioni corrisponde un vuoto $|0, \alpha\rangle$ e uno spazio di Hilbert \mathcal{H}_α ottenuto applicando \mathcal{R} a $|0, \alpha\rangle$.

Per sapere quale soluzione rappresenta la situazione fisica, teniamo presente che gli operatori che consideriamo vanno visti come approssimazioni degli operatori corrispondenti a volume finito; possiamo allora identificare lo stato fondamentale fisico con lo stato fondamentale che ha densità di energia più bassa, tra quelli che corrispondono alle soluzioni (i) e (ii).

Si calcola cioè la densità di energia e che compare nella (15-2) partendo dalla condizione

$$\langle 0 | K | 0 \rangle = 0$$

e il calcolo esplicito mostra che essa è minore per le soluzioni di tipo (ii) che per quelle di tipo (i), e che per le soluzioni di tipo (ii) è indipendente dal valore del parametro.

Ciò porta allora a interpretare come soluzioni fisicamente rilevanti quelle corrispondenti a (ii). Esaminiamo quindi più da vicino le soluzioni di tipo (ii). Osserviamo anzitutto che gli operatori fisicamente osservabili sono operatori hermitiani che contengono un ugual numero di ψ^+ e di ψ ; ciò significa che sono invarianti per le trasformazioni di gauge

$$\psi \mapsto e^{i\alpha} \psi \quad \psi^+ \mapsto e^{-i\alpha} \psi^+.$$

È facile vedere che per tale trasformazione di gauge sui campi anche la funzione Δ subisce una trasformazione di gauge, e precisamente, grazie alla (15-11):

$$\Delta \mapsto e^{2i\alpha} \Delta.$$

Si ottiene allora il risultato che i valori medi sul vuoto di grandezze fisicamente osservabili (gauge-invarianti) sono uguali per tutte le soluzioni di tipo (ii); questo giustifica l'affermazione fatta più sopra a proposito dell'indipendenza da α di $\langle 0|K|0\rangle$.

Infatti, se esistesse una trasformazione unitaria che connette una rappresentazione α con una rappresentazione α' , detto $|\Phi\rangle$ il trasformato di $|0, \alpha\rangle$, si avrebbe

$$\langle 0, \alpha|Q^{(\alpha)}|0, \alpha\rangle = \langle \Phi|Q^{(\alpha')}|\Phi\rangle \quad (15-13)$$

e perciò

$$|\Phi\rangle \neq |0, \alpha'\rangle$$

dato che gli operatori non gauge-invarianti hanno valore medio sul vuoto che dipende da α' . D'altra parte, se la (15-13) fosse verificata, $|\Phi\rangle$ sarebbe invariante per traslazioni, e quindi dovrebbe essere uguale a $|0, \alpha'\rangle$.

Questa situazione è molto simile a quella che si presenta per le soluzioni del modello di Goldstone (pag. 14-2 e segg.); in entrambi i casi soluzioni che differiscono per una fase danno luogo a rappresentazioni inequivalenti.

Notiamo ancora che gli stati di \mathcal{H}_α non hanno un numero di particelle definito, com'è da attendersi in base alle considerazioni fatte più sopra a proposito dell'operatore "numero di particelle," che non commuta con l'Hamiltoniana K' . In effetti l'operatore numero di particelle è il generatore delle trasformazioni di gauge che, in base a quanto sopra osservato, mandano uno spazio \mathcal{H}_α in uno spazio $\mathcal{H}_{\alpha'}$ (senza che questa applicazione possa venire espressa da un operatore unitario.)

Vedendo la cosa in altri termini, si possono identificare tutti gli \mathcal{H}_α , che sono ovviamente isomorfi; ma questa identificazione non porta a coincidere i campi dato che, come si è visto, le relative rappresentazioni non sono equivalenti.

Osserviamo infine che il passaggio al limite (*debole*) per $V \rightarrow \infty$ è essenziale per la soluzione del problema; in effetti, per un volume finito, $\Delta(\vec{z})$ *non* è una funzione numerica e un'unica rappresentazione irriducibile di \mathcal{R} contiene sia stati

che corrispondono alle soluzioni di tipo (i) che stati che approssimano le soluzioni di tipo (ii). Solo per $V \rightarrow \infty$ questa rappresentazione “più grande” si riduce nel modo visto.

Come si è ricordato sopra, gli spazi \mathcal{H}_α non sono gauge-invarianti; i loro stati non hanno cioè numero di particelle definito. Costruiremo ora uno spazio invariante per trasformazioni di gauge, in cui esistono stati a numero di particelle definito.

Infiniti stati di vuoto, rappresentazioni inequivalenti, rotture spontanee

In generale, in un sistema a infiniti gradi di libertà, uno stato può venir caratterizzato sia assegnando gli operatori che lo creano a partire dal vuoto, sia assegnando i valori medi sul vuoto di ogni osservabile di \mathcal{R} . Secondo quest'ultimo punto di vista, uno stato è caratterizzato dalle funzioni

$$W(\vec{x}_1, \dots, \vec{x}_m; \vec{y}_1, \dots, \vec{y}_n) = \langle \Phi | \psi^+(\vec{x}_1) \cdots \psi^+(\vec{x}_m) \psi(\vec{y}_1) \cdots \psi(\vec{y}_n) | \Phi \rangle.$$

Definiamo ora “stato con numero definito di particelle” uno stato in cui si annullano i valori medi di tutte le grandezze non gauge-invarianti. Possiamo così definire lo stato $|\Omega\rangle$:

$$W_\Omega(\vec{x}_1, \dots, \vec{x}_m; \vec{y}_1, \dots, \vec{y}_n) \stackrel{\text{def}}{=} \langle \Omega | \psi^+(\vec{x}_1) \cdots \psi^+(\vec{x}_m) \psi(\vec{y}_1) \cdots \psi(\vec{y}_n) | \Omega \rangle \\ = \begin{cases} \langle 0, \alpha | \psi^+(\vec{x}_1) \cdots \psi^+(\vec{x}_m) \psi(\vec{y}_1) \cdots \psi(\vec{y}_m) | 0, \alpha \rangle & \text{se } m = n \\ 0 & \text{se } m \neq n. \end{cases}$$

La definizione è chiaramente indipendente da α . Si può verificare che $|\Omega\rangle$ soddisfa la condizione di positività

$$\langle \Omega | Q^+ Q | \Omega \rangle \geq 0 \quad \forall Q \in \mathcal{R}$$

ed è possibile verificare che $|\Omega\rangle$ è invariante per traslazioni e dà luogo alla stessa densità di energia che gli stati $|0, \alpha\rangle$.

Possiamo allora considerare lo spazio di Hilbert \mathcal{H}_Ω generato applicando gli elementi di \mathcal{R} a $|\Omega\rangle$. È possibile costruire una realizzazione di \mathcal{H}_Ω definendo i vettori $|\Phi\rangle$ di \mathcal{H}_Ω come funzioni della variabile α a valori vettori a norma integrabile di \mathcal{H}_0 (\mathcal{H}_0 rappresenta tutte le sue copie “isomorfe” \mathcal{H}_α).

Il prodotto scalare sia definito da

$$(\Phi, \Psi) = \int d\alpha \langle \Phi_\alpha | \Psi_\alpha \rangle. \quad (15-14)$$

In questo modo \mathcal{H}_Ω risulta integrale diretto degli spazi \mathcal{H}_α :⁽¹⁾

$$\mathcal{H}_\Omega = \int d\alpha \mathcal{H}_\alpha$$

Il vuoto è evidentemente dato dalla funzione che ad ogni α associa il valore $|0\rangle$, cioè lo stato di vuoto dello spazio \mathcal{H}_0 :

$$|\Omega(\alpha)\rangle = |0\rangle.$$

È facile convincersi che una trasformazione di gauge $e^{i\beta}$ applicata a uno stato descritto dalla funzione $|\Phi\rangle$ lo trasforma in una funzione $|\Phi_\beta\rangle$:

$$|\Phi_\beta(\alpha)\rangle = |\Phi(\beta + \alpha)\rangle.$$

In particolare

$$|\Omega\rangle \mapsto |\Omega_\beta\rangle$$

cioè resta invariato.

Lo spazio \mathcal{H}_Ω risulta allora gauge-invariante, cioè esistono stati di \mathcal{H}_Ω che possiedono un numero definito di particelle; la trasformazione di gauge non dà più luogo a rappresentazioni inequivalenti, come accadeva per gli spazi \mathcal{H}_α . I campi in \mathcal{H}_Ω vanno definiti come segue:

$$\psi_\Omega: \psi_\Omega|\Phi\rangle = |\chi\rangle; \quad |\chi(\alpha)\rangle = e^{i\alpha/2}\psi|\Phi(\alpha)\rangle.$$

Si consideri ora l'operatore U :

$$U = \Delta^+(\vec{z})^{-1} \lim \frac{1}{V} \int \psi_1^+(\vec{x}) \psi_2^+(\vec{x} + \vec{z}) w(\vec{z}, \vec{z}') d^3x d^3z'.$$

Tale operatore è unitario in \mathcal{H}_Ω , indipendente da \vec{z} , e commuta con tutti gli elementi di \mathcal{R} ; ma non è un numero. Infatti su uno spazio \mathcal{H}_α (cfr. (15-6)) U ha l'autovalore

$$\frac{\Delta_\alpha^*(\vec{z})}{\Delta_0(\vec{z})} = e^{-i\alpha}.$$

Applicando U a $|\Omega\rangle$, il vettore che definisce $|\Omega\rangle$ viene moltiplicato per una fase dipendente da α :

$$|\Omega_2\rangle = U|\Omega\rangle; \quad |\Omega_2(\alpha)\rangle = e^{-i\alpha}|0\rangle.$$

⁽¹⁾ Per gli aspetti matematici della definizione d'integrale diretto si veda ad es. [26].

È facile dimostrare che il vettore $|\Omega_2\rangle$ è ortogonale a $|\Omega\rangle$ secondo la metrica (15-14), e che è gauge-invariante (a meno di una fase). È allora possibile costruire infiniti vuoti ortogonali, ciascuno dei quali è gauge-invariante, mediante applicazione di U^n a $|\Omega\rangle$.

Riassumendo, possiamo dire che mentre U si riduce a un numero in \mathcal{H}_α e la trasformazione di gauge manda \mathcal{H}_α in uno spazio inequivalente $\mathcal{H}_{\alpha+\beta}$, in \mathcal{H}_Ω la trasformazione di gauge si riduce a un numero (lasciando inalterati i vettori di \mathcal{H}_Ω), mentre l'operatore U manda il vuoto $|\Omega\rangle$ nel vuoto ortogonale $|\Omega_2\rangle$, etc.

La ragione di questo stato di cose è unica, e si può ricondurre al fatto che l'Hamiltoniana $K' = H + H'_i$, usata per risolvere il modello, non è gauge-invariante: la trasformazione di gauge (o il numero di particelle) non commutano con l'operatore $I(\vec{z})$ (15-5) che con il suo autovalore $\Delta(\vec{z})$ definisce le rappresentazioni irriducibili di \mathcal{R} . Ora l'identificazione di H con H' può venir fatta solo su una rappresentazione irriducibile, corrispondentemente cioè a una particolare scelta per la funzione $\Delta(\vec{z})$; ciò però non si può fare in maniera gauge-invariante, ed è quindi da attendersi che si presentino situazioni come quelle delle rappresentazioni inequivalenti "generate" dalla trasformazione di gauge, il che in effetti accade (per gli spazi \mathcal{H}_α). L'introduzione dello spazio \mathcal{H}_Ω ha come vantaggio la possibilità di avere stati a numero di particelle definito. \mathcal{H}_Ω non fornisce ovviamente una rappresentazione irriducibile dell'algebra \mathcal{R} , dato che in \mathcal{H}_Ω esistono infiniti vuoti, tutti gauge-invarianti.

La riduzione di questa rappresentazione, che non è propriamente una riduzione, ma una "disintegrazione," riporta alle rappresentazioni già viste.