Many-Body Theory: V compito

Simone Orioli

Anno accademico 2013/2014

1 Esercizio 1

Mostrare che la seguente espansione in serie è verificata:

$$e^{-T}\mathcal{H}e^{T} = \mathcal{H} + [\mathcal{H},T] + \frac{1}{2}[[\mathcal{H},T],T] + \frac{1}{3!}[[[\mathcal{H},T],T],T] + \dots \tag{1}$$

Cominciamo osservando che:

$$\begin{aligned}
[[\mathcal{H},T],T] &= [\mathcal{H}T - T\mathcal{H}, T] \\
&= ((\mathcal{H}T - T\mathcal{H})T - T(\mathcal{H}T - T\mathcal{H})) \\
&= \mathcal{H}T^2 - T\mathcal{H}T - T\mathcal{H}T + T^2\mathcal{H} \\
&= \mathcal{H}T^2 - 2T\mathcal{H}T + T^2\mathcal{H}
\end{aligned}$$

ed inoltre che

$$\begin{aligned}
[[[\mathcal{H},T],T],T] &= [[\mathcal{H}T - T\mathcal{H},T],T] \\
&= [\mathcal{H}T^2 - 2T\mathcal{H}T + T^2\mathcal{H}, T] \\
&= \mathcal{H}T^3 - 2T\mathcal{H}T^2 + T^2\mathcal{H}T - T\mathcal{H}T^2 + 2T^2\mathcal{H}T - T^3\mathcal{H} \\
&= \mathcal{H}T^3 - 3T\mathcal{H}T^2 + 3T^2\mathcal{H}T - T^3\mathcal{H}
\end{aligned}$$

Conseguentemente

$$\tfrac{1}{2}[[\mathcal{H},T],T] = \underbrace{\frac{1}{2}\mathcal{H}T^2}_{A} - \underbrace{T\mathcal{H}T}_{B} + \underbrace{\frac{1}{2}T^2\mathcal{H}}_{C} \tag{2}$$

$$[[[\mathcal{H},T],T],T] = \underbrace{\frac{1}{6}\mathcal{H}T^3}_{D} - \underbrace{\frac{1}{2}T\mathcal{H}T^2}_{E} + \underbrace{\frac{1}{2}T^2\mathcal{H}T}_{F} - \underbrace{\frac{1}{6}T^3\mathcal{H}}_{G} \tag{3}$$

Espandiamo allora l'espressione fino a $o(T^4)$:

$$\begin{aligned}
e^{-T}\mathcal{H}e^{T} &= \left(\mathbf{1} - T + \frac{T^2}{2} - \frac{T^3}{6} + o(T^4)\right)\mathcal{H}\left(\mathbf{1} + T + \frac{T^2}{2} + \frac{T^3}{6} + o(T^4)\right) \\
&= \left(\mathcal{H} - T\mathcal{H} + \frac{T^2}{2}\mathcal{H} - \frac{T^3}{6}\mathcal{H} + o(T^4)\right)\left(\mathbf{1} + T + \frac{T^2}{2} + \frac{T^3}{6} + o(T^4)\right) \\
&= \mathcal{H} + \mathcal{H}T + \mathcal{H}\frac{T^2}{2} - \mathcal{H}\frac{T^3}{6} - T\mathcal{H} - T\mathcal{H}T - T\mathcal{H}\frac{T^2}{2} + \frac{T^2}{2}\mathcal{H} + \frac{T^2}{2}\mathcal{H}T - \frac{T^3}{6}\mathcal{H} + o(T^4) \\
&= \mathcal{H} + [\mathcal{H},T] + \mathcal{H}\frac{T^2}{2} - \mathcal{H}\frac{T^3}{6} - T\mathcal{H}T - T\mathcal{H}\frac{T^2}{2} + \frac{T^2}{2}\mathcal{H} + \frac{T^2}{2}\mathcal{H}T - \frac{T^3}{6}\mathcal{H} + o(T^4)
\end{aligned}$$

Osserviamo allora che

$$e^{-T}\mathcal{H}e^{T} = \mathcal{H} + [\mathcal{H},T] + \underbrace{\mathcal{H}\frac{T^2}{2}}_{A} - \underbrace{\mathcal{H}\frac{T^3}{6}}_{D} - \underbrace{T\mathcal{H}T}_{B} - \underbrace{T\mathcal{H}\frac{T^2}{2}}_{E} + \underbrace{\frac{T^2}{2}\mathcal{H}}_{C} + \underbrace{\frac{T^2}{2}\mathcal{H}T}_{F} - \underbrace{\frac{T^3}{6}\mathcal{H}}_{G} + o(T^4) \tag{4}$$

ovvero lo sviluppo in serie è corretto.

2 Esercizio 2

Mostrare che lo Jacobiano della trasformazione dalle coordinate cartesiane a quelle di Jacobi per particelle con sta la stessa massa è $J(\boldsymbol{\xi}_1,\ldots,\boldsymbol{\xi}_A) = 1$.

Le coordinate di Jacobi per particelle con la stessa massa sono definite come:

$$\boldsymbol{\xi}_i = \frac{1}{A-i}\sum_{j=i+1}^{A}\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_i \qquad i = 1,\ldots,A \tag{5}$$

Conseguentemente, lo Jacobiano della trasformazione di coordinate è dato da:

$$J(\boldsymbol{\xi}_1,\ldots,\boldsymbol{\xi}_A) = \left|\det\begin{pmatrix} \frac{\partial \mathbf{r}_1}{\partial \boldsymbol{\xi}_1} & \cdots & \frac{\partial \mathbf{r}_A}{\partial \boldsymbol{\xi}_1} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial \mathbf{r}_1}{\partial \boldsymbol{\xi}_A} & \cdots & \frac{\partial \mathbf{r}_A}{\partial \boldsymbol{\xi}_A} \end{pmatrix}\right| \qquad \frac{\partial \mathbf{r}_i}{\partial \boldsymbol{\xi}_j} \equiv \begin{pmatrix} \frac{\partial x_i}{\partial \xi_j^x} & \frac{\partial y_i}{\partial \xi_j^x} & \frac{\partial z_i}{\partial \xi_j^x} \\ \frac{\partial x_i}{\partial \xi_j^y} & \frac{\partial y_i}{\partial \xi_j^y} & \frac{\partial z_i}{\partial \xi_j^y} \\ \frac{\partial x_i}{\partial \xi_j^z} & \frac{\partial y_i}{\partial \xi_j^z} & \frac{\partial z_i}{\partial \xi_j^z} \end{pmatrix} \tag{6}$$

Consideriamo il caso unidimensionale di 3 particelle: situazioni a più particelle e in più dimensioni risultano soltanto in calcoli più complicati, mentre il concetto è già esplicitamente enucleato nel caso in questione. Scriviamo in maniera estesa le coordinate di Jacobi:

$$\begin{aligned} \xi_1 &= \frac{1}{3}(x_1 + x_2 + x_3) \\ \xi_2 &= \frac{1}{2}(x_2 + x_3) - x_1 \\ \xi_3 &= x_3 - x_2 \end{aligned}$$

Possiamo riscrivere la precedente espressione in forma matriciale:

$$\begin{pmatrix} \xi_1 \\ \xi_2 \\ \xi_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{1}{3} & \frac{1}{3} & \frac{1}{3} \\ -1 & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ 0 & -1 & 1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix}$$

Invertendo la matrice otteniamo la trasformazione a cui siamo interessati:

$$\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = \frac{1}{6}\begin{pmatrix} 6 & -4 & 0 \\ 6 & 2 & -3 \\ 6 & 2 & -3 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \xi_1 \\ \xi_2 \\ \xi_3 \end{pmatrix}$$

Essendo la trasformazione di coordinate lineare nelle coordinate di Jacobi, abbiamo che lo Jacobiano è dato semplicemente dal modulo del determinante della matrice della trasformazione:

$$J(\xi_1,\xi_2,\xi_3) = \left|\frac{1}{6}\det\begin{pmatrix} 6 & -4 & 0 \\ 6 & 2 & -3 \\ 6 & 2 & -3 \end{pmatrix}\right| = 1$$

da cui si ottiene quanto volevasi dimostrare.

3 Exercizio 3

Scrivere la matrice che connette le coordinate delle particelle alle coordinate di Jacobi.

Le coordinate di Jacobi sono definite come

$$\begin{aligned}
\boldsymbol{\xi}_1 &= \mathbf{R}_{CM} \\
\boldsymbol{\xi}_2 &= \mathbf{r}_1 - \mathbf{R}_{N,N-1,\dots,1} \\
&\vdots \\
\boldsymbol{\xi}_{N-2} &= \mathbf{r}_{N-2} - \mathbf{R}_{N,N-1} \\
\boldsymbol{\xi}_N &= \mathbf{r}_{N-1} - \mathbf{R}_N
\end{aligned}$$

dove $\mathbf{R}$ è la coordinata del CM. Se le masse delle particelle sono uguali, allora la matrice del cambio di coordinate è ottenuta come

$$\begin{pmatrix} \boldsymbol{\xi}_1 \\ \boldsymbol{\xi}_2 \\ \vdots \\ \boldsymbol{\xi}_N \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{1}{N} & \frac{1}{N} & \frac{1}{N} & \dots & \dots & \dots & \frac{1}{N} \\ 1 & -\frac{1}{N-1} & -\frac{1}{N-1} & -\frac{1}{N-1} & \dots & \dots & -\frac{1}{N-1} \\ \vdots & & & & & & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & 0 & 1 & -\frac{1}{2} & -\frac{1}{2} \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 1 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{r}_1 \\ \mathbf{r}_2 \\ \vdots \\ \mathbf{r}_N \end{pmatrix}$$

4 Esercizio 4

Scrivere i momenti coniugati $\vec{\pi_i}$ delle coordinate di Jacobi $\vec{\xi_i}$ nel caso di 4 particelle con la stessa massa.

Per un sistema di quattro particelle con la stessa massa m, le coordinate di Jacobi sono definite come

$$\begin{aligned}
\boldsymbol{\xi}_1 &= \frac{m}{4}(\mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_2 + \mathbf{r}_3 + \mathbf{r}_4) \\
\boldsymbol{\xi}_2 &= \mathbf{r}_1 - \frac{m}{3}(\mathbf{r}_2 + \mathbf{r}_3 + \mathbf{r}_4) \\
\boldsymbol{\xi}_3 &= \mathbf{r}_2 - \frac{m}{2}(\mathbf{r}_3 + \mathbf{r}_4) \\
\boldsymbol{\xi}_4 &= \mathbf{r}_3 - \mathbf{r}_4
\end{aligned}$$

che in forma matriciale può essere espresso come

$$J = \begin{pmatrix} \frac{1}{4} & \frac{1}{4} & \frac{1}{4} & \frac{1}{4} \\ 1 & -\frac{1}{3} & -\frac{1}{3} & -\frac{1}{3} \\ 0 & 1 & -\frac{1}{2} & -\frac{1}{2} \\ 0 & 0 & 1 & -1 \end{pmatrix}$$

Per scrivere la lagrangiana in termini delle coordinate di Jacobi abbiamo bisogno della matrice J^{-1}, data da

$$J^{-1} = \begin{pmatrix} 1 & \frac{3}{4} & 0 & 0 \\ 1 & -\frac{1}{4} & \frac{2}{3} & 0 \\ 1 & -\frac{1}{4} & -\frac{1}{3} & \frac{1}{2} \\ 1 & -\frac{1}{4} & -\frac{1}{3} & -\frac{1}{2} \end{pmatrix}$$

Questa matrice ci permette di riscrivere le coordinate di Jacobi in funzione delle coordinate delle particelle nel seguente modo:

$$
\begin{aligned}
\mathbf{r}_1 &= \boldsymbol{\xi}_1 + \frac{3}{4}\boldsymbol{\xi}_2 \\
\mathbf{r}_2 &= \boldsymbol{\xi}_1 - \frac{1}{4}\boldsymbol{\xi}_2 + \frac{2}{3}\boldsymbol{\xi}_3 \\
\mathbf{r}_3 &= \boldsymbol{\xi}_1 - \frac{1}{4}\boldsymbol{\xi}_2 - \frac{1}{3}\boldsymbol{\xi}_3 + \frac{1}{2}\boldsymbol{\xi}_4 \\
\mathbf{r}_4 &= \boldsymbol{\xi}_1 - \frac{1}{4}\boldsymbol{\xi}_2 - \frac{1}{3}\boldsymbol{\xi}_3 - \frac{1}{2}\boldsymbol{\xi}_4
\end{aligned}
$$

Conseguentemente, la lagrangiana $\mathcal{L}$ può essere scritta in termini delle coordinate di Jacobi:

$$\mathcal{L} = \frac{m}{2}(\dot{\mathbf{r}}_1^2 + \dot{\mathbf{r}}_2^2 + \dot{\mathbf{r}}_3^2 + \dot{\mathbf{r}}_4^2) - V(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3, \mathbf{r}_4) = \frac{m}{2}(4\dot{\boldsymbol{\xi}}_1^2 + \frac{3}{4}\dot{\boldsymbol{\xi}}_2^2 + \frac{2}{3}\dot{\boldsymbol{\xi}}_3^2 + \frac{1}{2}\dot{\boldsymbol{\xi}}_4^2) - V(\boldsymbol{\xi}_1, \boldsymbol{\xi}_2, \boldsymbol{\xi}_3, \boldsymbol{\xi}_4)$$

ed i momenti coniugati possono essere ottenuti calcolando i corrispondenti gradienti

$$\boldsymbol{\pi}_i = \boldsymbol{\nabla}_{\dot{\boldsymbol{\xi}}_i}\mathcal{L}$$

Calcolando esplicitamente le derivate si ottiene il seguente risultato:

$$\boldsymbol{\pi}_1 = 4m\dot{\boldsymbol{\xi}}_1 \qquad \boldsymbol{\pi}_2 = \frac{3}{4}m\dot{\boldsymbol{\xi}}_2 \qquad \boldsymbol{\pi}_3 = \frac{2}{3}m\dot{\boldsymbol{\xi}}_3 \qquad \boldsymbol{\pi}_4 = \frac{m}{2}\dot{\boldsymbol{\xi}}_4$$

da cui, infine

$$\begin{pmatrix} \mathbf{p}_1 \\ \mathbf{p}_2 \\ \mathbf{p}_3 \\ \mathbf{p}_4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{1}{4} & 1 & 0 & 0 \\ \frac{1}{4} & -\frac{1}{2} & 1 & 0 \\ \frac{1}{4} & -\frac{1}{3} & -\frac{1}{2} & 1 \\ \frac{1}{4} & -\frac{1}{3} & -\frac{1}{2} & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \boldsymbol{\pi}_1 \\ \boldsymbol{\pi}_2 \\ \boldsymbol{\pi}_3 \\ \boldsymbol{\pi}_4 \end{pmatrix}$$

Exercise 3

Scrivere l'hamiltoniana dell'atomo di elio in termini delle coordinate di Jacobi e dei loro momenti coniugati.

L'hamiltoniana dell'atomo di elio è data da

$$H = \frac{\mathbf{p}_1^2}{2M} + \frac{\mathbf{p}_2^2 + \mathbf{p}_3^2}{2m} - \frac{e^2}{|\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1|} - \frac{e^2}{|\mathbf{r}_3 - \mathbf{r}_1|} + \frac{e^2}{|\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_3|} = T + V$$

dove "1" e M si riferiscono al nucleo, mentre "2","3" ed m si riferiscono agli elettroni. Le coordinate di Jacobi del sistema sono

$$
\begin{aligned}
\boldsymbol{\xi}_1 &= \frac{M\mathbf{r}_1 + m(\mathbf{r}_2 + \mathbf{r}_3)}{2m + M} \\
\boldsymbol{\xi}_2 &= \mathbf{r}_1 - \frac{\mathbf{r}_2 + \mathbf{r}_3}{2} \\
\boldsymbol{\xi}_3 &= \mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_3
\end{aligned}
$$

e conseguentemente

$$\begin{aligned}\mathbf{r}_1 &= \boldsymbol{\xi}_1 + \frac{2m}{2m+M}\boldsymbol{\xi}_2 \\ \mathbf{r}_2 &= \boldsymbol{\xi}_1 - \frac{M}{2m+M}\boldsymbol{\xi}_2 + \frac{1}{2}\boldsymbol{\xi}_3 \\ \mathbf{r}_3 &= \boldsymbol{\xi}_1 - \frac{M}{2m+M}\boldsymbol{\xi}_2 - \frac{1}{2}\boldsymbol{\xi}_3\end{aligned}$$

Consideriamo allora la lagrangiana del sistema

$$\begin{aligned}L &= \frac{1}{2}(M\dot{\mathbf{r}}_1^2 + m\dot{\mathbf{r}}_2^2 + m\dot{\mathbf{r}}_3^2) - V(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3) = \\ &= \frac{M+2m}{2}\dot{\boldsymbol{\xi}}_1^2 + \frac{Mm}{M+2m}\dot{\boldsymbol{\xi}}_2^2 + \frac{m}{4}\dot{\boldsymbol{\xi}}_3^2 - V(\boldsymbol{\xi}_1, \boldsymbol{\xi}_2, \boldsymbol{\xi}_3)\end{aligned}$$

La trasformazione di Legendre che connette i momenti coniugati $\vec{\pi_i} = \vec{\nabla}_{\dot{\xi}_i} L$ alle velocità generalizzate è

$$\begin{aligned}\boldsymbol{\pi}_1 &= (M+2m)\dot{\boldsymbol{\xi}}_1 \\ \boldsymbol{\pi}_2 &= \frac{2Mm}{M+2m}\dot{\boldsymbol{\xi}}_2 \\ \boldsymbol{\pi}_3 &= \frac{m}{2}\dot{\boldsymbol{\xi}}_3\end{aligned}$$

da cui otteniamo

$$\begin{aligned}\boldsymbol{\pi}_1 &= \mathbf{p}_1 + \mathbf{p}_2 + \mathbf{p}_3 \\ \boldsymbol{\pi}_2 &= \frac{2m}{M+2m}\mathbf{p}_1 - \frac{M}{M+2m}(\mathbf{p}_2 + \mathbf{p}_3) \\ \boldsymbol{\pi}_3 &= \frac{1}{2}(\mathbf{p}_2 - \mathbf{p}_3)\end{aligned}$$

La trasformazione inversa è data da

$$\begin{aligned}\mathbf{p}_1 &= \frac{M}{2m+M}\boldsymbol{\pi}_1 + \frac{2mM}{2m+M}\boldsymbol{\pi}_2 \\ \mathbf{p}_2 &= \frac{m}{2m+M}\boldsymbol{\pi}_1 - \frac{mM}{2m+M}\boldsymbol{\pi}_2 + \boldsymbol{\pi}_3 \\ \mathbf{p}_3 &= \frac{m}{2m+M}\boldsymbol{\pi}_1 - \frac{mM}{2m+M}\boldsymbol{\pi}_2 - \boldsymbol{\pi}_3\end{aligned}$$

L'hamiltoniana del sistema può essere ottenuta dalla lagrangiana tramite la definizione

$$H = \sum_i (\nabla_{\dot{\boldsymbol{\xi}}_i} L)\dot{\boldsymbol{\xi}}_i - L$$

Usando la trasformazione di Legendre sopra citata, il termine cinetico può essere espresso nella forma

$$\frac{1}{2}\frac{\boldsymbol{\pi}_1^2}{M+2m} + \frac{1}{2}\frac{\boldsymbol{\pi}_2^2}{\mu_1} + \frac{\boldsymbol{\pi}_3^2}{\mu_2}$$

dove $\mu_1 = \frac{2Mm}{M+2m}$ e $\mu_2 = \frac{m}{2}$. D'altra parte, il potenziale espresso in coordinate di Jacobi è

$$V = -\frac{e^2}{|\boldsymbol{\xi}_2 - \boldsymbol{\xi}_3/2|} - \frac{e^2}{|\boldsymbol{\xi}_2 + \boldsymbol{\xi}_3/2|} + \frac{e^2}{|\boldsymbol{\xi}_3|}$$

Finalmente, grazie al principio di corrispondenza, associamo $\boldsymbol{\pi}_i = i\nabla_{\boldsymbol{\xi}_i}$ e l'hamiltoniana del sistema nel sistema di riferimento in cui il nucleo si trova nell'origine otteniamo

$$H = -\frac{1}{2\mu_1}\nabla^2_{\boldsymbol{\xi}_2} + \frac{1}{2\mu_2}\nabla^2_{\boldsymbol{\xi}_3} - \frac{e^2}{|\boldsymbol{\xi}_2 - \boldsymbol{\xi}_3/2|} - \frac{e^2}{|\boldsymbol{\xi}_2 + \boldsymbol{\xi}_3/2|} + \frac{e^2}{|\boldsymbol{\xi}_3|}$$