

Mecánica cuántica II

Aníbal Iucci

20 de abril de 2023

Índice general

1. Segunda cuantificación	5
1.1. Espacio de Fock	8
1.2. Operadores de creación y destrucción	10
1.2.1. Operadores de un cuerpo	18
1.2.2. Operadores de dos cuerpos	25
1.2.3. Resolviendo con segunda cuantificación	29
1.3. Apéndice: Transformada de Fourier discreta	41

Capítulo 1

Segunda cuantificación

Queremos considerar ahora el caso de muchas partículas cuánticas. Normalmente este es un problema que sabemos muy bien cómo tratar en mecánica cuántica: si conocemos el espacio de Hilbert \mathcal{H}_1 de una sola partícula y una base completa $|\alpha\rangle$, sabemos que para \mathcal{N} partículas tenemos un espacio de Hilbert que se construye como el producto directo de los espacios individuales:

$$\mathcal{H}_{\mathcal{N}} = \bigotimes_{i=1}^{\mathcal{N}} \mathcal{H}_i, \quad (1.1)$$

y que una base completa de tal espacio es simplemente

$$|\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_{\mathcal{N}}\rangle = |\alpha_1\rangle \otimes |\alpha_2\rangle \cdots |\alpha_{\mathcal{N}}\rangle. \quad (1.2)$$

Entonces tenemos que resolver una ecuación de Schrödinger con una función de onda que depende de las \mathcal{N} variables correspondientes a las \mathcal{N} partículas, $\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3, \dots, \mathbf{r}_{\mathcal{N}})$. Aunque este es un programa perfectamente aceptable cuando el número de partículas es pequeño, es particularmente inadecuado para abordar el caso de muchos fermiones o bosones cuánticos que interactúan, por varias razones.

La primera tiene que ver con la indistinguibilidad de las partículas. Incluso si son libres entre ellas, no todos los estados son aceptables para las funciones de onda de \mathcal{N} partículas indistinguibles, para las que sólo se permiten las funciones de onda totalmente simétricas (para bosones) o antisimétricas (para fermiones). Esto significa que incluso para partículas que no interactúan no podemos usar directamente estados producto de la forma (1.2). En cierto modo, el hecho de que tengamos que lidiar con partículas indistinguibles ya introduce correlaciones en la función de onda incluso cuando las interacciones no están presentes. La función de onda se vuelve bastante complicada ya que deben estar correctamente (anti-)simetrizadas y normalizadas, lo que las hace

muy difíciles de manejar. Por ejemplo, para dos partículas se tiene

$$|\alpha, \beta\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} [|\alpha, \beta\rangle \pm |\beta, \alpha\rangle] \quad (1.3)$$

donde el signo $+$ corresponde a bosones y el $-$ a fermiones. En la fórmula anterior denotamos por $|\alpha, \beta\rangle$ a los kets correctamente simetrizados y normalizados para partículas indistinguibles, mientras que a los kets producto los escribimos

$$|\alpha, \beta\rangle = |\alpha\rangle \otimes |\beta\rangle = |\alpha\rangle \otimes |\beta\rangle. \quad (1.4)$$

Nótese que en este caso el orden importa: la primera partícula está en el estado α y la segunda β . Siempre (independientemente de si se trata de un bra o un ket) numeraremos las partículas de izquierda a derecha.

Cuando el número de partículas crece, el uso de una función de onda simetrizada se vuelve más y más pesado ya que el número de términos en la función de onda crece como $\mathcal{N}!$. De hecho, la función de onda en general se escribe como

$$\begin{aligned} \psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_\mathcal{N}) &= (\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_\mathcal{N} | \alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_\mathcal{N}) \\ &= C \sum_P (\pm 1)^{s(P)} \varphi_1(\mathbf{r}_{P_1}) \varphi_2(\mathbf{r}_{P_2}) \cdots \varphi_\mathcal{N}(\mathbf{r}_\mathcal{N}) \end{aligned} \quad (1.5)$$

donde $\varphi_\alpha(\mathbf{r}) = \langle \mathbf{r} | \alpha \rangle$ es la función de onda correspondiente al estado α de las partículas individuales. Para simplificar la notación, en la ecuación anterior hemos escrito $\varphi_1(\mathbf{r})$ en lugar de $\varphi_{\alpha_1}(\mathbf{r})$, y lo mismo con las demás. P son las permutaciones del conjunto de números del 1 al \mathcal{N} , $s(P)$ es la firma o signatura de la permutación P (es decir, el número de transposiciones en P) y, como de costumbre, el signo $+$ es para bosones y el $-$ para fermiones. La constante C debe determinarse de manera que la función de onda esté correctamente normalizada. Para los fermiones, se puede reescribir la función de onda como un determinante (conocido como determinante de Slater)¹

$$\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_\mathcal{N}) = \begin{vmatrix} \varphi_1(\mathbf{r}_1) & \cdots & \varphi_1(\mathbf{r}_\mathcal{N}) \\ \vdots & & \vdots \\ \varphi_\mathcal{N}(\mathbf{r}_1) & \cdots & \varphi_\mathcal{N}(\mathbf{r}_\mathcal{N}) \end{vmatrix}. \quad (1.6)$$

lo que ayuda un poco para los cálculos prácticos, pero no mucho. En resumen, incluso para los electrones que no interactúan, habría que tratar con funciones de onda que contuvieran $10^{23}!$ términos, lo cual es realmente desagradable.

¹En el caso bosónico puede representarse mediante un objeto análogo conocido como “permanente”, que se calcula como un determinante, pero utilizando siempre signos $+$ en los distintos términos.

El segundo problema está relacionado con la forma en que representamos a los operadores en la mecánica cuántica estándar. Si consideramos, por ejemplo, un operador que mide el momento total de un sistema de partículas, éste tiene que escribirse como una suma de operadores que actúan sobre cada partícula individualmente:

$$P_{\text{tot}} = \sum_{i=1}^{\mathcal{N}} P_i \quad (1.7)$$

donde P_i es el operador que actúa sobre la partícula i -ésima. Téngase en cuenta que esto es un abuso de notación ya que P_{tot} es un operador de $\mathcal{H}_{\mathcal{N}}$, que rigurosamente se debe escribir como

$$P_i = \mathbf{1} \otimes \mathbf{1} \otimes \dots \otimes P \otimes \dots \otimes \mathbf{1}, \quad (1.8)$$

donde $\mathbf{1}$ es la identidad y P se inserta en la posición i -ésima. El operador y las funciones de onda dependen así explícitamente del número de partículas. Por lo tanto, uno debería cambiar completamente todo el cálculo dependiendo de si miramos 2 o 20000 partículas, lo que nuevamente es particularmente molesto. También impide tomar de manera directa el límite termodinámico $\mathcal{N} \rightarrow \infty$ cuando el volumen de los sistemas también tiende a infinito. Dada la gran cantidad de partículas, está claro que tomar este límite es lo deseable ya que simplificaría mucho los cálculos.

Una tercera razón, quizás más profunda y más física, y que definitivamente liquida la posibilidad de utilizar la mecánica cuántica usual, es que ¡en muchos sistemas el número de partículas no se conserva! y esta sí. Esto puede ocurrir por varias razones, por ejemplo, en sistemas de altas energías, porque buscamos describir sistemas de partículas que pueden aniquilarse y convertirse en otras, tales como electrones y positrones. O para un ejemplo más ligado a los materiales, mencionemos el modelo BCS para un superconductor, que discutiremos en el capítulo siguiente. Veremos que las cuasipartículas fermiónicas que son responsables de la superconductividad se forman por una superposición de electrones y huecos y no se conservan en número.

Por estas razones, debemos buscar una reformulación de la representación estándar de la mecánica cuántica (también conocida como primera cuantificación) para sistemas de varias partículas indistinguibles. Idealmente deberíamos hallar un formalismo que se ocupe automáticamente de lo siguiente:

1. Que la simetrización o antisimetrización se realizara de manera automática sin tener que tratar explícitamente con $\mathcal{N}!$ términos.
2. Que La forma de describir el sistema no dependa explícitamente del número de partículas presentes en él. Esto debería permitir tomar el

límite termodinámico fácilmente y también abordar situaciones más generales en las que el número de partículas puede cambiar.

Esto lo proporciona el llamado método de “segunda cuantificación” que describiremos en este capítulo².

1.1. Espacio de Fock

La idea básica es convertir el hecho de que las partículas sean indistinguibles en una ventaja. De hecho, si este es el caso, significa que no es necesario conocer el estado cuántico de cada partícula individual, sino simplemente cuántas partículas hay en un estado cuántico dado. Supongamos que uno tiene una base completa $|\alpha\rangle$ de estados para una sola partícula. En general, esta base es infinita, pero si el sistema se pone en una caja, se pueden cuantificar los estados (por ejemplo, cuantificando el momento) y tener un número finito de estados (generalmente proporcional al volumen del sistema Ω). Así, denotamos todos los estados en esta base como

$$|\alpha_1\rangle, |\alpha_2\rangle, \dots, |\alpha_\Omega\rangle, \quad (1.9)$$

donde hemos usado la notación $|\alpha_\Omega\rangle$ para el último estado para recordar que, en general, el número total de estados en esta base crece con el volumen del sistema. Téngase en cuenta que el tamaño de la base no está relacionado con la cantidad de partículas que están presentes en el sistema. Para los bosones, por ejemplo, uno podría tener una base completa de los estados de una partícula que contienen solo dos estados y tener 10000 bosones presentes en el sistema (ya que varios de ellos pueden ir en el mismo estado cuántico). Para los fermiones, por supuesto, el número total de partículas siempre es menor que el número total de estados disponibles debido al principio de Pauli. Como se muestra en la figura 1.1, podemos describir completamente el sistema y reconstruir su función de onda si conocemos el número de partículas n_i en cada estado $|\alpha_i\rangle$ de la base completa de estados de partículas individuales, y por lo tanto, podemos caracterizar completamente la función de onda del sistema mediante el conjunto de números $n_1, n_2, \dots, n_\Omega$. El número total de partículas en el sistema es, por supuesto, $\mathcal{N} = n_1 + n_2 + \dots + n_\Omega$, y puede variar si uno varía uno de los n_i .

Definamos entonces un espacio en el que puedan existir un número arbitrario de partículas. Si llamamos $\mathcal{H}_\mathcal{N}$ al espacio de Hilbert con \mathcal{N} partículas,

²La terminología usual de “primera” y “segunda” cuantificación es bastante desafortunada. Da a entender que hay otro objeto que ahora se está cuantificando, más específicamente la función de onda, pero esto es incorrecto, como veremos más adelante.

Figura 1.1: El estado de un sistema con un número arbitrario de partículas indistinguibles se conoce por completo si se sabe cuántas partículas hay en un estado cuántico determinado.

como en la ec. (1.1), podemos definir

$$\mathcal{F} = \bigoplus_{j=0}^{+\infty} \mathcal{H}_j \quad (1.10)$$

que es la suma directa de todos los espacios de Hilbert con 0, 1, 2, etc. partículas. Tal espacio se llama espacio de Fock. En este espacio definamos ahora el estado

$$|n_1, n_2, n_3, \dots, n_\Omega\rangle \quad (1.11)$$

donde, como se muestra en la Fig. 1.1, n_i es el número de partículas en el estado cuántico $|\alpha_i\rangle$. Podemos dar completamente la expresión de la función de onda correspondiente al estado (1.11). Si llamamos $\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_\mathcal{N}$ a las posiciones de cada partícula (téngase en cuenta que $\mathcal{N} = n_1 + n_2 + \dots + n_\Omega$), tenemos

$$\begin{aligned} (\mathbf{r}_1 \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_\mathcal{N} | n_1, n_2, \dots, n_\Omega) = & \frac{\sqrt{\mathcal{N}!}}{\sqrt{n_1!} \dots \sqrt{n_\Omega!}} S_\pm \left[\overbrace{\varphi_1(\mathbf{r}_1) \varphi_2(\mathbf{r}_2) \dots \varphi_2(\mathbf{r}_{n_1})}^{n_1 \text{ términos}} \right. \\ & \overbrace{\varphi_2(\mathbf{r}_{n_1+1}) \varphi_2(\mathbf{r}_{n_1+2}) \dots \varphi_2(\mathbf{r}_{n_1+n_2})}^{n_2 \text{ términos}} \dots \\ & \left. \overbrace{\varphi_\Omega(\mathbf{r}_{n_1+\dots+n_{\Omega-1}+1}) \varphi_\Omega(\mathbf{r}_{n_1+\dots+n_{\Omega-1}+2}) \dots \varphi_\Omega(\mathbf{r}_{n_1+\dots+n_{\Omega-1}+n_\Omega})}^{n_\Omega \text{ términos}} \right]. \quad (1.12) \end{aligned}$$

Aquí los prefactores aseguran que la función de onda esté adecuadamente normalizada. El (anti)simetrizador S_\pm se define como

$$S_\pm [\phi_1(\mathbf{r}_1) \dots \phi_\mathcal{N}(\mathbf{r}_\mathcal{N})] = \frac{1}{\mathcal{N}!} \sum_P (\pm 1)^{s(P)} \phi_1(\mathbf{r}_{P_1}) \phi_2(\mathbf{r}_{P_2}) \dots \phi_\mathcal{N}(\mathbf{r}_{P_\mathcal{N}}). \quad (1.13)$$

Dos estados de la forma (1.11) que tienen un número diferente de partículas \mathcal{N} pertenecen a dos espacios de Hilbert diferentes y, por lo tanto, son obviamente ortogonales en el espacio de Fock. Para sistemas con el mismo número total de partículas, se puede verificar usando la función de onda (1.12) que los estados (1.11) para una base ortogonal y normalizada satisfacen

$$\langle n_1, n_2, \dots, n_\Omega | n'_1, n'_2, \dots, n'_\Omega \rangle = \delta_{n_1, n'_1} \delta_{n_2, n'_2} \dots \delta_{n_\Omega, n'_\Omega} \quad (1.14)$$

Por lo tanto, podemos usar la base (1.11) para caracterizar cada operador y elemento de matriz en el espacio de Fock. Como se mencionó antes, esta base es extremadamente conveniente ya que se basa en la cantidad mínima de información necesaria para describir un sistema de partículas indistinguibles. En particular, el número de “contadores” n_i necesarios no crece con el número total de partículas.

1.2. Operadores de creación y destrucción

Introduciremos a continuación un conjunto de operadores que nos permitirá generar todos los elementos de la base (1.11). Para cada estado α_i de la base completa de una sola partícula, definimos un operador de creación y destrucción, que aumentará o disminuirá en uno el número de partículas en este estado particular. De este modo, podremos usar estos operadores para modificar el contador n_i dando el número de partículas en un estado cuántico dado, y así abarcar todo el espacio de Fock. La definición práctica de estos operadores es diferente dependiendo de la estadística de las partículas.

Bosones

Introducimos los operadores de creación a_i^\dagger y destrucción a_i por su acción sobre todos los estados de una base completa en el espacio de Fock, en la forma

$$\begin{aligned} a_i^\dagger |n_1, \dots, n_i, \dots, n_\Omega\rangle &= \sqrt{n_i + 1} |n_1, \dots, n_i + 1, \dots, n_\Omega\rangle, \\ a_i |n_1, \dots, n_i, \dots, n_\Omega\rangle &= \sqrt{n_i} |n_1, \dots, n_i - 1, \dots, n_\Omega\rangle. \end{aligned} \quad (1.15)$$

Estas definiciones determinan por completo a los operadores por sus elementos de matriz en la base de números de ocupación (1.11). Comprobemos que los operadores a_i^\dagger y a_i son efectivamente hermíticos conjugados uno del otro. Dado que (1.11) es una base ortogonal, el único elemento de matriz distinto de cero para a_i^\dagger es

$$\langle n_1, \dots, n_i + 1, \dots, n_\Omega | a_i^\dagger | n_1, \dots, n_i, \dots, n_\Omega \rangle = \sqrt{n_i + 1}. \quad (1.16)$$

Tomando el complejo conjugado de esta expresión se obtiene

$$\langle n_1, \dots, n_i, \dots, n_\Omega | a_i | n_1, \dots, n_i + 1, \dots, n_\Omega \rangle = \sqrt{n_i + 1}, \quad (1.17)$$

que de hecho es exactamente la definición del operador a_i en (1.15) (con el reemplazo de n_i por $n_i + 1$). Otra propiedad importante de los operadores es

que solo abarcan el espacio de Fock. De hecho, aunque parece formalmente de (1.15) que el operador a_i podría operar en un estado que tiene $n_i = 0$ partículas en el estado α_i el prefactor en la definición asegura que el elemento de matriz correspondiente es cero:

$$a_i |n_1, \dots, n_i = 0, \dots, n_\Omega\rangle = 0, \quad (1.18)$$

y así, si uno intenta aplicar el operador de destrucción en un estado que no tiene ninguna partícula en el estado cuántico correspondiente, obtiene un resultado trivial, lo que significa que no se pueden generar estados no físicos con números de ocupación negativos.

Si definimos el estado que no contiene partículas en ninguno de los estados cuánticos (a veces denominado vacío) en la forma

$$|0\rangle = |n_1 = 0, n_2 = 0, \dots, n_\Omega = 0\rangle, \quad (1.19)$$

se verifica que a partir de este vacío $|0\rangle$ y los operadores a_i^\dagger podemos construir todos los vectores de la base completa del espacio de Fock, ya que

$$|n_1, \dots, n_i, \dots, n_\Omega\rangle = \frac{(a_1^\dagger)^{n_1} \dots (a_\Omega^\dagger)^{n_\Omega}}{\sqrt{n_1!} \dots \sqrt{n_\Omega!}} |0\rangle. \quad (1.20)$$

Por lo tanto, uno puede generar completamente el espacio de Fock desde el estado único $|0\rangle$ mediante los operadores de creación (y destrucción ya que son conjugados hermíticos). El vacío verifica la propiedad de que para cualquier i

$$a_i |0\rangle = 0 \quad (1.21)$$

Debemos tener cuidado de no mezclar el vacío $|0\rangle$, que es un vector del espacio de Fock, y uno sobre el que los operadores pueden actuar para dar otros estados del espacio de Fock, con el cero 0.

Los operadores de creación y destrucción constituyen así una manera muy conveniente de describir el espacio de Fock. En lugar de definirlos a partir de sus elementos de matriz en una base dada, tal como (1.11), es más conveniente definirlos a partir de sus propiedades intrínsecas. Mostremos que la definición (1.15) implica que los operadores a_i^\dagger y a_i poseen ciertas relaciones de conmutación específicas. Y a la inversa, si se obedecen estas relaciones de conmutación, entonces los operadores, y el vacío correspondiente definido por (1.19), servirán para construir un espacio de Fock a partir de (1.20) en el que tendrán los elementos de matriz (1.16) y (1.17).

Calculemos primero la acción de un producto de dos operadores de creación a_i^\dagger y a_j^\dagger en estados distintos ($i \neq j$) sobre un estado arbitrario de la

base:

$$\begin{aligned} a_i^\dagger a_j^\dagger |n_1, \dots, n_i, \dots, n_j, \dots, n_\Omega\rangle &= a_i^\dagger \sqrt{n_j + 1} |n_1, \dots, n_i, \dots, n_j + 1, \dots, n_\Omega\rangle \\ &= \sqrt{n_i + 1} \sqrt{n_j + 1} |n_1, \dots, n_i + 1, \dots, n_j + 1, \dots, n_\Omega\rangle. \end{aligned} \quad (1.22)$$

y es fácil comprobar que la acción de $a_j^\dagger a_i^\dagger$ producirá exactamente el mismo resultado. Así, para cualquier elemento de la base se tiene

$$[a_i^\dagger, a_j^\dagger] |n_1, \dots, n_i, \dots, n_j, \dots, n_\Omega\rangle = 0, \quad (1.23)$$

lo que significa que

$$[a_i^\dagger, a_j^\dagger] = 0. \quad (1.24)$$

Dado que un operador conmuta consigo mismo, esto también es cierto cuando $i = j$. Tomando el hermítico conjugado del conmutador anterior obtenemos

$$[a_i, a_j] = 0. \quad (1.25)$$

Veamos ahora qué ocurre si calculamos la acción del producto de un operador de destrucción con uno de creación, siempre con ($i \neq j$):

$$\begin{aligned} a_i^\dagger a_j |n_1, \dots, n_i, \dots, n_j, \dots, n_\Omega\rangle &= a_i^\dagger \sqrt{n_j} |n_1, \dots, n_i, \dots, n_j - 1, \dots, n_\Omega\rangle \\ &= \sqrt{n_i + 1} \sqrt{n_j} |n_1, \dots, n_i + 1, \dots, n_j - 1, \dots, n_\Omega\rangle \end{aligned} \quad (1.26)$$

y de manera similar la acción de $a_j a_i^\dagger$ (con $i \neq j$) daría el mismo resultado. Se tiene así $[a_i^\dagger, a_j] = 0$ cuando $i \neq j$. El caso $i = j$ es especial. Por un lado tenemos que

$$\begin{aligned} a_i^\dagger a_i |n_1, \dots, n_i, \dots, n_\Omega\rangle &= a_i^\dagger \sqrt{n_i} |n_1, \dots, n_i - 1, \dots, n_\Omega\rangle \\ &= \sqrt{(n_i - 1) + 1} \sqrt{n_i} |n_1, \dots, n_i, \dots, n_\Omega\rangle \\ &= n_i |n_1, \dots, n_i, \dots, n_\Omega\rangle, \end{aligned} \quad (1.27)$$

y por otra parte

$$\begin{aligned} a_i a_i^\dagger |n_1, \dots, n_i, \dots, n_\Omega\rangle &= a_i \sqrt{n_i + 1} |n_1, \dots, n_i + 1, \dots, n_\Omega\rangle \\ &= \sqrt{n_i + 1} \sqrt{n_i + 1} |n_1, \dots, n_i, \dots, n_\Omega\rangle \\ &= (n_i + 1) |n_1, \dots, n_i, \dots, n_\Omega\rangle. \end{aligned} \quad (1.28)$$

Concluimos entonces que

$$[a_i, a_i^\dagger] |n_1, \dots, n_i, \dots, n_\Omega\rangle = |n_1, \dots, n_i, \dots, n_\Omega\rangle. \quad (1.29)$$

Juntando los dos resultados, encontramos finalmente que el conmutador es

$$[a_i, a_j^\dagger] = \delta_{i,j}. \quad (1.30)$$

Se puede entonces resumir las propiedades de los operadores de creación y destrucción mediante el conjunto de relaciones fundamentales

$$\begin{aligned} [a_i, a_j^\dagger] &= \delta_{i,j}, \\ [a_i^\dagger, a_j^\dagger] &= 0, \\ [a_i, a_j] &= 0. \end{aligned} \quad (1.31)$$

llamado también álgebra de los operadores. Junto con la acción de los operadores de destrucción sobre el vacío (1.21), son equivalentes a las definición de los elementos de matriz (1.17) y (1.16). Esto implica que si disponemos de

1. Una base completa $|\alpha_i\rangle$ de estados de partículas individuales (y las funciones de onda correspondientes $\langle \mathbf{r} | \alpha_i \rangle$)
2. Operadores de creación y destrucción, a_i^\dagger y a_i , para cada uno de estos estados, que obedecen relaciones conmutación canónicas (1.31).
3. Un vacío $|0\rangle$ que es destruido por los operadores de destrucción $a_i|0\rangle = 0$,

podemos construir completamente un espacio de Fock para bosones. La idea es entonces explotar directamente las propiedades anteriores y utilizar las relaciones de conmutación canónicas entre los operadores bosónicos para calcular las propiedades físicas, en lugar de las funciones de onda. Esta descripción se conoce como segunda cuantificación.

Tomemos por ejemplo el siguiente estado de dos partículas:

$$|\psi\rangle = a_1^\dagger a_2^\dagger |0\rangle. \quad (1.32)$$

y reconstruyamos la expresión para la función de onda usando (1.12). Se obtiene

$$\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \langle \mathbf{r}_1 \mathbf{r}_2 | \psi \rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} [\varphi_{\alpha_1}(\mathbf{r}_1) \varphi_{\alpha_2}(\mathbf{r}_2) + \varphi_{\alpha_1}(\mathbf{r}_2) \varphi_{\alpha_2}(\mathbf{r}_1)], \quad (1.33)$$

que es la función correctamente simetrizada que describe dos bosones. Sin embargo, el interés de la segunda cuantificación es apegarse a los operadores y sus relaciones de conmutación y evitar volver a las funciones de onda, que

en general son bastante intratables. Por ejemplo, los operadores de creación conmutan entre sí, y por lo tanto $a_1^\dagger a_2^\dagger = a_2^\dagger a_1^\dagger$. Entonces

$$a_1^\dagger a_2^\dagger |0\rangle = a_2^\dagger a_1^\dagger |0\rangle, \quad (1.34)$$

y así la función de onda $|\psi\rangle$ resulta ser simétrica por permutación de las partículas. Los operadores de creación y destrucción están así directamente diseñados para tener en cuenta adecuadamente la simetrización de las funciones de onda y la indistinguibilidad de las partículas. De hecho, las relaciones de conmutación permiten obtener directamente la información sin pasar por ningún proceso de simetrización. En particular, los promedios se pueden calcular directamente. Ilustrémoslo calculando la normalización de la función $|\psi\rangle$. Queremos calcular

$$\langle\psi|\psi\rangle = \langle 0|a_2 a_1 a_1^\dagger a_2^\dagger|0\rangle. \quad (1.35)$$

Aunque este es un ejemplo específico, veremos que generalmente todos los observables físicos se reducen al promedio en el vacío de un determinado producto de los operadores de creación y destrucción, por lo que el método que describimos se puede aplicar de manera general. Para calcular el promedio, lo único que necesitamos usar es el hecho de que el vacío es destruido por todos los a_i . Por tanto, utilizando las relaciones de conmutación, deberíamos llevar los operadores a_i a la derecha, de modo de hacerlos actuar sobre el vacío. Para actuar sobre el vacío. Primero escribimos $a_1 a_1^\dagger = 1 + a_1^\dagger a_1$ de la relación de conmutación. Tenemos entonces

$$\begin{aligned} \langle\psi|\psi\rangle &= \langle 0|a_2(1 + a_1^\dagger a_1)a_2^\dagger|0\rangle, \\ &= \langle 0|a_2 a_2^\dagger|0\rangle + \langle 0|a_2 a_1^\dagger a_1 a_2^\dagger|0\rangle. \end{aligned} \quad (1.36)$$

En el segundo término podemos usar ahora la relación de conmutación $a_1 a_2^\dagger = a_2^\dagger a_1$ para reescribirlo como $\langle 0|a_2 a_1^\dagger a_2^\dagger a_1|0\rangle$ que inmediatamente da cero. Para el primero usamos de nuevo las relaciones de conmutación, y obtenemos

$$\begin{aligned} \langle\psi|\psi\rangle &= \langle 0|a_2 a_2^\dagger|0\rangle = \langle 0|(1 + a_2^\dagger a_2)|0\rangle, \\ &= \langle 0|1|0\rangle, \\ &= 1. \end{aligned} \quad (1.37)$$

Aunque los cálculos pueden volverse tediosos cuando crece el número de operadores, la mecánica siempre es la misma, y con un poco de práctica se pueden acelerar.

Fermiones

Pasemos ahora a los operadores de creación y destrucción de fermiones. De manera similar que para los bosones, definimos

$$\begin{aligned} c_i^\dagger |n_1, \dots, n_i, \dots, n_\Omega\rangle &= (1 - n_i)(-1)^{\epsilon_i} |n_1, \dots, n_i + 1, \dots, n_\Omega\rangle, \\ c_i |n_1, \dots, n_i, \dots, n_\Omega\rangle &= n_i(-1)^{\epsilon_i} |n_1, \dots, n_i - 1, \dots, n_\Omega\rangle, \end{aligned} \quad (1.38)$$

donde $\epsilon_i = \sum_{j=1}^{i-1} n_j$ y $\epsilon_1 = 0$. El orden de los elementos en la base debe fijarse una vez, y utilizar siempre la misma convención, pero, por supuesto, es arbitraria.

En estas definiciones, algunos términos son bastante transparentes: dado que para los fermiones el principio de Pauli impide que dos fermiones estén en el mismo estado, los números de ocupación n_i están restringido a tomar los valores 0 o 1. Por lo tanto, es importante que el operador de creación no pueda crear dos partículas en un estado, lo cual queda asegurado por el factor $1 - n_i$ que garantiza que si c_i^\dagger actúa sobre un estado con $n_i = 1$ entonces la acción del operador dará cero. De manera similar, el factor n_i asegura que el operador de destrucción no puede destruir una partícula en el estado para el cual $n_i = 0$. La física del factor extraño $(-1)^{\epsilon_i}$ no es obvia por el momento, y uno podría tener la tentación de definir los operadores sin tal factor de fase. Veremos su utilidad un poco más adelante.

Procedemos ahora exactamente como con los bosones: comprobemos primero que los operadores c_i^\dagger y c_i son efectivamente hermiticos conjugados uno del otro. De hecho, los cálculos con fermiones son más simples en cierto sentido, ya que para cada estado α_i solo hay dos posibilidades $n_i = 0$ o $n_i = 1$ para el estado correspondiente. El único elemento de matriz distinto de cero para el operador c_i^\dagger es

$$\langle n_1, \dots, n_i = 1, \dots, n_\Omega | c_i^\dagger | n_1, \dots, n_i = 0, \dots, n_\Omega \rangle = (-1)^{\epsilon_i}. \quad (1.39)$$

mientras que para c_i el único elemento de matriz distinto de cero es

$$\langle n_1, \dots, n_i = 0, \dots, n_\Omega | c_i | n_1, \dots, n_i = 1, \dots, n_\Omega \rangle = (-1)^{\epsilon_i}. \quad (1.40)$$

que obviamente es el complejo conjugado del otro.

Para continuar con las relaciones de conmutación y comprender el papel de los coeficientes $(-1)^{\epsilon_i}$, veamos primero la acción de $c_i c_i^\dagger$. Como esto solo afecta al estado α_i , podemos simplemente considerar su acción sobre los dos estados con $n_i = 0$ y $n_i = 1$:

$$\begin{aligned} c_i c_i^\dagger |n_1, \dots, n_i = 0, \dots, n_\Omega\rangle &= (-1)^{\epsilon_i} c_i |n_1, \dots, n_i = 1, \dots, n_\Omega\rangle \\ &= (-1)^{2\epsilon_i} |n_1, \dots, n_i = 0, \dots, n_\Omega\rangle \\ &= |n_1, \dots, n_i = 0, \dots, n_\Omega\rangle \end{aligned} \quad (1.41)$$

Por otro lado,

$$c_i^\dagger c_i |n_1, \dots, n_i = 0, \dots, n_\Omega\rangle = 0. \quad (1.42)$$

Nótese que en este resultado los factores $(-1)^{\epsilon_i}$ no juegan ningún papel, y podríamos haber definido los operadores sin incluirlos. En forma similar,

$$c_i c_i^\dagger |n_1, \dots, n_i = 1, \dots, n_\Omega\rangle = 0 \quad (1.43)$$

$$c_i^\dagger c_i |n_1, \dots, n_i = 1, \dots, n_\Omega\rangle = |n_1, \dots, n_i = 1, \dots, n_\Omega\rangle.$$

Se observa entonces que $[c_i, c_i^\dagger]$ no tiene ninguna expresión simple. En cambio, el anticonmutador

$$[c_i, c_i^\dagger]_+ = c_i c_i^\dagger + c_i^\dagger c_i \quad (1.44)$$

conduce a

$$[c_i, c_i^\dagger]_+ |n_1, \dots, n_i, \dots, n_\Omega\rangle = |n_1, \dots, n_i, \dots, n_\Omega\rangle, \quad (1.45)$$

y por lo tanto

$$[c_i, c_i^\dagger]_+ = 1 \quad (1.46)$$

Por lo tanto, se puede adivinar que en lugar del conmutador, es el anticonmutador el que jugará un papel importante. El rol del factor $(-1)^{\epsilon_i}$ será, por lo tanto, asegurar que para las otras combinaciones también se obtengan relaciones simples para el anticonmutador. Ilustrémoslo con la acción de $c_i c_j^\dagger$ con $i \neq j$. Suponiendo que $i < j$, tenemos que

$$\begin{aligned} c_i c_j^\dagger |n_1, \dots, n_i, \dots, n_j, \dots, n_\Omega\rangle &= (1 - n_j)(-1)^{\epsilon_j} c_i |n_1, \dots, n_i, \dots, n_j + 1, \dots, n_\Omega\rangle \\ &= (1 - n_j)(-1)^{\epsilon_j} n_i (-1)^{\epsilon_i} |n_1, \dots, n_i - 1, \dots, n_j + 1, \dots, n_\Omega\rangle. \end{aligned} \quad (1.47)$$

Por otro lado,

$$\begin{aligned} c_j^\dagger c_i |n_1, \dots, n_i, \dots, n_j, \dots, n_\Omega\rangle &= n_i (-1)^{\epsilon_i} c_j^\dagger |n_1, \dots, n_i - 1, \dots, n_j, \dots, n_\Omega\rangle \\ &= (1 - n_j)(-1)^{\epsilon'_j} n_i (-1)^{\epsilon_i} |n_1, \dots, n_i - 1, \dots, n_j + 1, \dots, n_\Omega\rangle. \end{aligned} \quad (1.48)$$

El término ϵ'_j corresponde al factor de fase en un estado con $n_i - 1$ en lugar de n_i . Así, $\epsilon'_j = \epsilon_j - 1$. En ausencia de dichos términos de fase, las dos expresiones (1.47) y (1.48) serían idénticas y tendríamos que $[c_i, c_j^\dagger] = 0$. Gracias a los factores de fase ϵ_j ahora tenemos un signo menos entre los dos términos y la relación se convierte en

$$[c_i, c_j^\dagger]_+ = 0, \quad (1.49)$$

lo que permitirá definir los operadores c_i sólo en términos de sus anticonmutadores. Es fácil comprobar las restantes relaciones, y así se tiene, de forma similar que para los bosones,

$$\begin{aligned} [c_i, c_j^\dagger]_+ &= \delta_{i,j}, \\ [c_i^\dagger, c_j^\dagger]_+ &= 0, \\ [c_i, c_j]_+ &= 0. \end{aligned} \tag{1.50}$$

Por otro lado, de la misma forma que para los bosones, se puede construir todos los estados del espacio de Fock a partir de un vacío $|0\rangle$ que es destruido por todos los $c_i(c_i|0\rangle = 0)$ usando la relación (1.20)

Las funciones de onda y los promedios se pueden calcular también con las mismas técnicas que antes, veamos como ejemplo la función de onda de dos fermiones en los estados α_1 y α_2 :

$$|\psi\rangle = c_1^\dagger c_2^\dagger |0\rangle. \tag{1.51}$$

y entonces, de (1.12) la función de onda resulta

$$\langle \mathbf{r}_1 \mathbf{r}_2 | \psi \rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} [\alpha_1(\mathbf{r}_1) \alpha_2(\mathbf{r}_2) - \alpha_1(\mathbf{r}_2) \alpha_2(\mathbf{r}_1)], \tag{1.52}$$

que es, por supuesto, la función de onda correctamente antisimetrizada para fermiones. Sin ir a la función de onda, se puede ver directamente la antisimetrización a nivel de estados y operadores: usando la relación de anticonmutación $[c_1, c_2]_+ = 0$ se encuentra que

$$c_1^\dagger c_2^\dagger |0\rangle = -c_2^\dagger c_1^\dagger |0\rangle, \tag{1.53}$$

y así la función de onda $|\psi\rangle$ es obviamente antisimétrica por permutación de las partículas.

El hecho de que el operador c_i se ocupe automáticamente de la antisimetrización hace que sea muy conveniente escribir incluso funciones complicadas. Por ejemplo, el mar de Fermi, que corresponde a un estado donde todos los niveles con energía más baja que la energía de Fermi están ocupados. Para describir el estado de una partícula necesitamos una base completa, y para ello elegimos la base del momento $|\mathbf{k}\rangle$ para la parte orbital, mientras que para el sector de spin podemos tomar los dos estados propios de S_z denotados por $|\uparrow\rangle$ o $|\downarrow\rangle$ o $|\sigma = \pm\rangle$. Los estados α son así $\alpha = (\mathbf{k}, \sigma = \pm)$. Podemos entonces definir los operadores de creación correspondientes $c_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger$ que crean un electrón

con el momento \mathbf{k} y el espín $\sigma = \uparrow, \downarrow$. En términos de estos operadores, el mar de Fermi es simplemente

$$|F\rangle = \prod_{\mathbf{k}, \varepsilon(\mathbf{k}) \leq E_F} c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger c_{\mathbf{k}\downarrow}^\dagger |0\rangle. \quad (1.54)$$

Los promedios en el vacío se pueden calcular exactamente con la misma técnica descrita para los bosones. Por ejemplo, si tomamos $|\psi\rangle = c_1^\dagger |0\rangle$, entonces (usando las relaciones de anticonmutación),

$$\begin{aligned} \langle \psi | \psi \rangle &= \langle 0 | c_i c_i^\dagger | 0 \rangle \\ &= \langle 0 | 1 - c_i^\dagger c_i | 0 \rangle \\ &= \langle 0 | 1 | 0 \rangle = 1. \end{aligned} \quad (1.55)$$

Generalizando el cálculo anterior puede mostrarse el mar de Fermi está correctamente normalizado, $\langle F | F \rangle = 1$.

1.2.1. Operadores de un cuerpo

Ahora que tenemos definidos a los operadores que permiten construir todo el espacio de Fock, lo que queda por resolver es expresar los observables físicos que queremos calcular en términos de estos operadores. Para hacerlo, debemos tener en cuenta que los observables deben actuar sobre partículas indistinguibles, lo que establece algunas restricciones sobre su forma. Antes de dar sus expresiones en segunda cuantificación, es conveniente clasificarlos de acuerdo al número de partículas sobre las que actúan. Hay observables físicos que miden solo los números cuánticos de una partícula a la vez (tales como el momento, la densidad, etc.) y otros que necesitan tratar con los números cuánticos de dos de las partículas para determinar sus elementos de matriz. Este es caso, por ejemplo, del operador que mide las interacciones entre las partículas. El primer tipo se llama operadores de un cuerpo, mientras que el segundo es de dos cuerpos. En principio, se pueden tener operadores que involucren más de dos partículas (tales como colisiones de tres cuerpos y más), pero son de poca utilidad práctica en la física del estado sólido, por lo que discutiremos principalmente aquí los de uno y dos cuerpos. Las fórmulas dadas aquí se pueden generalizar fácilmente si es necesario.

Definición

Comencemos primero con los operadores de un cuerpo. De manera bastante general, llamemos O a un operador que representa alguna propiedad

Figura 1.2: El operador de un cuerpo en segunda cuantificación. El operador $c_\alpha^\dagger c_\beta$ cambia el estado cuántico de cualquier partícula en el sistema del estado β al estado α . El elemento de amplitud de dicho proceso está dado por los elementos de matriz del operador de una sola partícula $O^{(1)}$: $\langle \alpha | O^{(1)} | \beta \rangle$. Esto asegura que el operador $O^{(1)}$ esté operando en cada partícula a su vez.

de una partícula a la vez. Por supuesto, si O actúa en el espacio de Hilbert con \mathcal{N} partículas, debe actuar sobre cada partícula del sistema. Llamemos $O^{(1)}$ al operador que actúa en el espacio de Hilbert de una sola partícula; el operador O correspondiente a las \mathcal{N} partículas debe ser

$$O = O_1^{(1)} \otimes \mathbf{1}_2 \otimes \dots \otimes \mathbf{1}_{\mathcal{N}} + \mathbf{1}_1 \otimes O_2^{(1)} \otimes \dots \otimes \mathbf{1}_{\mathcal{N}} + \dots + \mathbf{1}_1 \otimes \dots \otimes O_{\mathcal{N}}^{(1)} \quad (1.56)$$

donde $O_i^{(1)}$ es el operador que actúa sobre la partícula i -ésima. El hecho de que en la suma anterior, todos los coeficientes sean idénticos, es la consecuencia directa del hecho de que las partículas son indistinguibles, y no podemos distinguir en una medida si un cierto conjunto de números cuánticos corresponden a una u otra partícula del sistema. La forma (1.56) es por lo tanto la forma más general posible de un operador de un solo cuerpo para partículas indistinguibles.

Para expresar (1.56) en segunda cuantificación, debemos comenzar por analizar qué sucede si tenemos un sistema con una sola partícula (si no hay ninguna partícula, un operador de un cuerpo es trivialmente nulo). En ese caso $O = O^{(1)}$ y usando la base completa α podemos escribir

$$O = \sum_{\alpha, \beta} |\alpha\rangle \langle \alpha | O^{(1)} | \beta \rangle \langle \beta |, \quad (1.57)$$

y luego utilizamos que $|\alpha\rangle = c_\alpha^\dagger |0\rangle$ para obtener

$$O = \sum_{\alpha, \beta} \langle \alpha | O^{(1)} | \beta \rangle c_\alpha^\dagger |0\rangle \langle 0 | c_\beta. \quad (1.58)$$

La interpretación física de esta fórmula es bastante simple: el operador c_β destruye una partícula en un estado β ; como solo tenemos una partícula en el sistema, nos vemos obligados a ir al vacío, luego, desde el vacío, el operador c_α^\dagger recrea la partícula en el estado α . El resultado neto es que todavía tenemos una partícula en el sistema pero ha cambiado su estado cuántico al pasar del estado β al estado α . La amplitud de dicha transición está dada por los elementos de matriz del operador $O^{(1)}$ entre los estados β y α .

Si en lugar de una partícula tuviéramos ahora un número arbitrario de partículas en el sistema, tendríamos que hacer exactamente lo mismo para

cada una de ellas, dejando invariantes los números cuánticos de las demás, como sugiere (1.56), y hacer la suma. Un operador que logra esto está dado por la expresión

$$O = \sum_{\alpha, \beta} \langle \alpha | O^{(1)} | \beta \rangle c_{\alpha}^{\dagger} c_{\beta} \quad (1.59)$$

que es idéntica a (1.58) excepto que no estamos obligados a ir al vacío después de la destrucción de la partícula en el estado β . De hecho, si hay varias partículas, el operador $c_{\alpha}^{\dagger} c_{\beta}$ cambiará el número cuántico de una partícula del estado β al estado α y dejará intactos los números cuánticos de todas las demás partículas del sistema. Sin embargo, el operador c_{β} operará en todas las partículas del sistema y, por lo tanto, hará esa transición para la primera, segunda, etc. realizando automáticamente la suma en (1.56). La interpretación de (1.59) se muestra en la figura 1.2.

La expresión (1.59) permite así representar cualquier operador de un solo cuerpo en segunda cuantificación, conociendo sólo la acción del operador $O^{(1)}$ en el espacio de una sola partícula. Nótese que las funciones de onda provenientes de la elección de la base completa α sólo intervienen en el cálculo de los elementos de matriz $\langle \alpha | O^{(1)} | \beta \rangle$. Una vez que se calculan estos elementos de matriz, todo el operador se reduce a una combinación lineal de operadores de creación y destrucción y, por lo tanto, todos los promedios físicos se pueden calcular mediante las técnicas descritas en la sección anterior, sin tener que volver a las funciones de onda. Por supuesto, todos los aspectos de su simetrización o la antisimetrización son tenidos en cuenta automáticamente por la naturaleza de los operadores de creación o destrucción.

Ejemplos

Comencemos con el operador que mide la densidad de partículas en un punto \mathbf{r}_0 , que para una partícula se escribe

$$\rho^{(1)}(\mathbf{r}_0) = |\mathbf{r}_0\rangle\langle\mathbf{r}_0|, \quad (1.60)$$

debido a que $\langle \psi | \rho^{(1)}(\mathbf{r}_0) | \psi \rangle = |\psi(\mathbf{r}_0)|^2$. En segunda cuantificación la forma del operador dependerá de la elección de la base completa α que tomemos. Empecemos tomando la base de autoestados de posición $|\mathbf{r}\rangle$, en cuyo caso, el operador $c_{\mathbf{r}}^{\dagger}$ es el operador que crea una partícula en el punto \mathbf{r} . Usando

esta base y la relación (1.59) se obtiene

$$\begin{aligned}
\rho(\mathbf{r}_0) &= \int d\mathbf{r}d\mathbf{r}' \langle \mathbf{r} | \mathbf{r}_0 \rangle \langle \mathbf{r}_0 | \mathbf{r}' \rangle c_{\mathbf{r}}^\dagger c_{\mathbf{r}'}, \\
&= \int d\mathbf{r}d\mathbf{r}' \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0) \delta(\mathbf{r}_0 - \mathbf{r}') c_{\mathbf{r}}^\dagger c_{\mathbf{r}'}, \\
&= c_{\mathbf{r}_0}^\dagger c_{\mathbf{r}_0}.
\end{aligned} \tag{1.61}$$

La expresión $c_{\mathbf{r}_0}^\dagger c_{\mathbf{r}_0}$ es particularmente simple de interpretar. El operador $c_{\mathbf{r}_0}^\dagger c_{\mathbf{r}_0}$ destruye y recrea una partícula en el mismo estado cuántico. Por lo tanto, no ha cambiado nada en el sistema. Sin embargo, la acción del operador $c_{\mathbf{r}_0}$ dará cero si no hay ninguna partícula a destruir en el estado cuántico correspondiente (aquí una partícula en el punto \mathbf{r}_0). El operador $c_{\mathbf{r}_0}^\dagger c_{\mathbf{r}_0}$ da cero si no hay ninguna partícula en el estado cuántico correspondiente y uno si hay una partícula. Por tanto, simplemente cuenta el número de partículas en el punto \mathbf{r}_0 . Generalmente, el operador $c_\alpha^\dagger c_\alpha$ simplemente cuenta el número de partículas en el estado α . El operador que cuenta el número total de partículas en el sistema está dado entonces por

$$N = \int d\mathbf{r} c_{\mathbf{r}}^\dagger c_{\mathbf{r}}. \tag{1.62}$$

La generalización al caso de partículas con spin es inmediata. Para ello la base completa será $\alpha = (\mathbf{r}, \sigma)$ y el operador densidad solo actúa en la parte espacial, por lo tanto

$$\rho^{(1)}(\mathbf{r}_0) = |\mathbf{r}_0\rangle \langle \mathbf{r}_0| \otimes \mathbf{1}_{\text{spin}}, \tag{1.63}$$

y así (1.59) da lugar a

$$\begin{aligned}
\rho(\mathbf{r}_0) &= \sum_{\sigma, \sigma'} \int d\mathbf{r}d\mathbf{r}' \langle \mathbf{r}\sigma | \mathbf{r}_0 \rangle \langle \mathbf{r}_0 | \mathbf{r}'\sigma' \rangle c_{\mathbf{r}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{r}'\sigma'}, \\
&= \sum_{\sigma, \sigma'} \int d\mathbf{r}d\mathbf{r}' \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0) \delta(\mathbf{r}_0 - \mathbf{r}') \delta_{\sigma\sigma'} c_{\mathbf{r}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{r}'\sigma'}, \\
&= c_{\mathbf{r}_0\uparrow}^\dagger c_{\mathbf{r}_0\uparrow} + c_{\mathbf{r}_0\downarrow}^\dagger c_{\mathbf{r}_0\downarrow}.
\end{aligned} \tag{1.64}$$

También podríamos calcular la densidad de spin a lo largo del eje z en el punto \mathbf{r}_0 . En ese caso el operador de una partícula es

$$S_z^{(1)}(\mathbf{r}_0) = |\mathbf{r}_0\rangle \langle \mathbf{r}_0| \otimes S_z, \tag{1.65}$$

y usando (1.59) se obtiene³

$$\begin{aligned}
S_z(\mathbf{r}_0) &= \sum_{\sigma, \sigma'} \int d\mathbf{r} d\mathbf{r}' \langle \mathbf{r} \sigma | \mathbf{r}_0 \rangle \langle \mathbf{r}_0 | \otimes S_z | \mathbf{r}' \sigma' \rangle c_{\mathbf{r} \sigma}^\dagger c_{\mathbf{r}' \sigma'}, \\
&= \sum_{\sigma \sigma'} \langle \sigma | S_z | \sigma' \rangle c_{\mathbf{r}_0 \sigma}^\dagger c_{\mathbf{r}_0 \sigma'}, \\
&= \frac{1}{2} (c_{\mathbf{r}_0 \uparrow}^\dagger c_{\mathbf{r}_0 \uparrow} - c_{\mathbf{r}_0 \downarrow}^\dagger c_{\mathbf{r}_0 \downarrow}).
\end{aligned} \tag{1.66}$$

De manera similar, la densidad de spin a lo largo de la dirección x es

$$\begin{aligned}
S_x(\mathbf{r}_0) &= \sum_{\sigma, \sigma'} \int d\mathbf{r} d\mathbf{r}' \langle \mathbf{r} \sigma | \mathbf{r}_0 \rangle \langle \mathbf{r}_0 | \otimes S_x | \mathbf{r}' \sigma' \rangle c_{\mathbf{r} \sigma}^\dagger c_{\mathbf{r}' \sigma'}, \\
&= \sum_{\sigma \sigma'} \langle \sigma | S_x | \sigma' \rangle c_{\mathbf{r}_0 \sigma}^\dagger c_{\mathbf{r}_0 \sigma'}, \\
&= \frac{1}{2} (c_{\mathbf{r}_0 \uparrow}^\dagger c_{\mathbf{r}_0 \downarrow} + c_{\mathbf{r}_0 \downarrow}^\dagger c_{\mathbf{r}_0 \uparrow}),
\end{aligned} \tag{1.67}$$

y para la dirección y ,

$$\begin{aligned}
S_y(\mathbf{r}_0) &= \sum_{\sigma, \sigma'} \int d\mathbf{r} d\mathbf{r}' \langle \mathbf{r} \sigma | \mathbf{r}_0 \rangle \langle \mathbf{r}_0 | \otimes S_y | \mathbf{r}' \sigma' \rangle c_{\mathbf{r} \sigma}^\dagger c_{\mathbf{r}' \sigma'}, \\
&= \sum_{\sigma \sigma'} \langle \sigma | S_y | \sigma' \rangle c_{\mathbf{r}_0 \sigma}^\dagger c_{\mathbf{r}_0 \sigma'}, \\
&= \frac{i}{2} (-c_{\mathbf{r}_0 \uparrow}^\dagger c_{\mathbf{r}_0 \downarrow} + c_{\mathbf{r}_0 \downarrow}^\dagger c_{\mathbf{r}_0 \uparrow}),
\end{aligned} \tag{1.68}$$

Alternativamente, podríamos haber usado la base de los autoestados del operador momento, $|\mathbf{k}\rangle$, cuyas funciones de onda son

$$\langle \mathbf{r} | \mathbf{k} \rangle = \frac{1}{\sqrt{\Omega}} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}. \tag{1.69}$$

³Recordemos que las expresiones de los operadores de spin en la base $|\pm\rangle$ son

$$\begin{aligned}
S_x &= \frac{1}{2} [|+\rangle\langle -| + |- \rangle\langle +|], \\
S_y &= \frac{i}{2} [-|+\rangle\langle -| + |- \rangle\langle +|], \\
S_z &= \frac{1}{2} [|+\rangle\langle +| - |- \rangle\langle +|].
\end{aligned}$$

Dado que el spin y la parte orbital son independientes, solo daremos las expresiones para el caso sin espín. Incorporar el spin se realiza exactamente de la misma forma que en la base de coordenadas. El operador $c_{\mathbf{k}}$ ahora destruye una partícula momento \mathbf{k} (es decir, en un estado de onda plana con momento \mathbf{k}). La ecuación (1.59) da lugar a

$$\begin{aligned}\rho(\mathbf{r}_0) &= \sum_{\mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2} \langle \mathbf{k}_1 | \mathbf{r}_0 \rangle \langle \mathbf{r}_0 | \mathbf{k}_2 \rangle c_{\mathbf{k}_1}^\dagger c_{\mathbf{k}_2}, \\ &= \frac{1}{\Omega} \sum_{\mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2} e^{-i\mathbf{k}_1 \mathbf{r}_0} e^{i\mathbf{k}_2 \mathbf{r}_0} c_{\mathbf{k}_1}^\dagger c_{\mathbf{k}_2}.\end{aligned}\tag{1.70}$$

La expresión (1.70) no es tan simple como (1.61) ya que el operador densidad no es diagonal en la base de momentos. Sin embargo, tanto (1.70) como (1.61) representan el mismo operador. Esto nos da una conexión directa entre los operadores que crean una partícula en el punto \mathbf{r} y los que crean una partícula con momento \mathbf{k} . Comparando las ecuaciones (1.70) y (1.61) se obtiene

$$c_{\mathbf{r}} = \frac{1}{\sqrt{\Omega}} \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} c_{\mathbf{k}}.\tag{1.71}$$

Esta expresión constituye un ejemplo de una transformación, en este caso lineal y dada por una transformada de tipo Fourier, entre operadores de creación. Esta transformación preserva los conmutadores, como puede verificarse en forma simple, y por lo tanto constituye un ejemplo de transformación canónica. Discutiremos más sobre este tema más adelante.

Usando la expresión (1.70) también podemos calcular el número total de partículas en el sistema:

$$\begin{aligned}N &= \int d\mathbf{r} \frac{1}{\Omega} \sum_{\mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2} e^{-i\mathbf{k}_1 \mathbf{r}} e^{i\mathbf{k}_2 \mathbf{r}} c_{\mathbf{k}_1}^\dagger c_{\mathbf{k}_2}, \\ &= \sum_{\mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2} \delta_{\mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2} c_{\mathbf{k}_1}^\dagger c_{\mathbf{k}_2}, \\ &= \sum_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}}^\dagger c_{\mathbf{k}},\end{aligned}\tag{1.72}$$

y si tenemos en cuenta que $c_{\mathbf{k}}^\dagger c_{\mathbf{k}}$ cuenta el número de partículas en el estado cuántico \mathbf{k} , se obtiene nuevamente que el número total de partículas es la suma de todos los números de partículas en todos los estados cuánticos posibles. Finalmente se puede usar (1.70) para obtener una expresión simple

de la transformada de Fourier de la densidad:

$$\begin{aligned}
\rho(\mathbf{q}) &= \int d\mathbf{r} e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}} \rho(\mathbf{r}), \\
&= \int d\mathbf{r} e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}} \frac{1}{\Omega} \sum_{\mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2} e^{-i\mathbf{k}_1\mathbf{r}} e^{i\mathbf{k}_2\mathbf{r}} c_{\mathbf{k}_1}^\dagger c_{\mathbf{k}_2}, \\
&= \sum_{\mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2} \delta_{\mathbf{k}_2, \mathbf{k}_1 + \mathbf{q}} c_{\mathbf{k}_1}^\dagger c_{\mathbf{k}_2}, \\
&= \sum_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k} - \mathbf{q}}^\dagger c_{\mathbf{k}}.
\end{aligned} \tag{1.73}$$

Otro operador importante es, por supuesto, la energía cinética de las partículas. Para una partícula se tiene $H^{(1)} = \frac{\mathbf{p}^2}{2m}$, y de manera más general, podríamos tener cualquier función del momento $H^{(1)} = \epsilon(\mathbf{p})$. Por lo tanto, es muy conveniente utilizar la base de momentos. La energía cinética se expresa así como

$$\begin{aligned}
H &= \sum_{\mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2} \langle \mathbf{k}_1 | \epsilon(\mathbf{p}) | \mathbf{k}_2 \rangle c_{\mathbf{k}_1}^\dagger c_{\mathbf{k}_2}, \\
&= \sum_{\mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2} \delta_{\mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2} \epsilon(\mathbf{k}_2) c_{\mathbf{k}_1}^\dagger c_{\mathbf{k}_2}, \\
&= \sum_{\mathbf{k}} \epsilon(\mathbf{k}) c_{\mathbf{k}}^\dagger c_{\mathbf{k}},
\end{aligned} \tag{1.74}$$

que tiene la interpretación simple de que la energía cinética total del sistema es la suma de el número de partículas en cada estado \mathbf{k} (dado por $c_{\mathbf{k}}^\dagger c_{\mathbf{k}}$) multiplicado por la energía cinética $\epsilon(\mathbf{k})$ de tal estado. La generalización para sistemas con spin es inmediata y, en general se obtiene

$$H = \sum_{\mathbf{k}\sigma} \epsilon(\mathbf{k}) c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}\sigma}, \tag{1.75}$$

asumiendo que la energía cinética no depende del espín (en ausencia de acoplamiento espín-órbita). Debemos tener en cuenta que dado que el número total de partículas es $N = \sum_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}}^\dagger c_{\mathbf{k}}$, agregar un potencial químico $-\mu N$ no cambia la forma del Hamiltoniano:

$$H = \sum_{\mathbf{k}\sigma} \xi(\mathbf{k}) c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}\sigma}, \tag{1.76}$$

y simplemente reemplaza $\epsilon(\mathbf{k})$ por $\xi(\mathbf{k}) = \epsilon(\mathbf{k}) - \mu$. A temperatura cero la energía $\xi(\mathbf{k})$ es cero en el nivel de Fermi, negativa por debajo, y positiva por encima.

1.2.2. Operadores de dos cuerpos

Veamos ahora los operadores que involucran dos partículas y como definir sus elementos de matriz. Es en particular el caso del potencial de interacción entre dos partículas

$$V = \sum_{i \neq j} V(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j). \quad (1.77)$$

Definición

Con un espíritu similar al de los operadores de un solo cuerpo, llamemos $O^{(2)}$ al operador correspondiente que actúa en el espacio de Hilbert de sólo dos partículas. El operador de dos cuerpos que actúa en $\mathcal{H}_{\mathcal{N}}$ debe tener la forma

$$O = \sum_{i < j} O_{i,j}^{(2)} \otimes_{k \neq i,j} \mathbf{1}_k = \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} O_{i,j}^{(2)} \otimes_{k \neq i,j} \mathbf{1}_k, \quad (1.78)$$

para que el operador $O^{(2)}$ pueda operar sobre cada par de partículas en el sistema. De manera similar que para los operadores de un solo cuerpo, los coeficientes en la suma anterior deben ser todos iguales, de lo contrario significaría que las partículas podrían distinguirse.

Para entender cómo escribir O en segunda cuantificación, veamos el caso en el que hay exactamente dos partículas en el sistema. Debemos definir el operador O por sus elementos de matriz en el espacio físico de las funciones (anti)simetrizadas $|\alpha, \beta\rangle$, lo que significa que debemos conocer todos los elementos

$$\langle \alpha, \beta | O^{(2)} | \gamma, \delta \rangle. \quad (1.79)$$

Tomemos primero la expresión (1.3) y escribamos $|\alpha, \beta\rangle$ en términos de los kets ordenados (1.4)

$$(\alpha, \beta | O^{(2)} | \gamma, \delta) = (\beta, \alpha | O^{(2)} | \delta, \gamma), \quad (1.80)$$

aquí la igualdad se debe a que simplemente estamos intercambiando partículas, y por lo tanto obtenemos

$$\langle \alpha, \beta | O^{(2)} | \gamma, \delta \rangle = (\alpha, \beta | O^{(2)} | \gamma, \delta) \pm (\alpha, \beta | O^{(2)} | \delta, \gamma). \quad (1.81)$$

Ahora deberíamos encontrar en segunda cuantificación un operador que reproduzca estos elementos de matriz y, por supuesto, funcione para \mathcal{N} partículas en lugar de dos. Se verifica que

$$O = \frac{1}{2} \sum_{\alpha, \beta, \gamma, \delta} (\alpha, \beta | O^{(2)} | \gamma, \delta) c_{\alpha}^{\dagger} c_{\beta}^{\dagger} c_{\delta} c_{\gamma}, \quad (1.82)$$

funciona tanto para fermiones como para bosones. No demostraremos esta relación en general, lo cual puede hacerse calculando los elementos de matriz a ambos lados, sino que simplemente comprobaremos que funciona para $\mathcal{N} = 2$ partículas. Calculemos, a partir de (1.82), los elementos de matriz

$$\langle \alpha_0, \beta_0 | O | \gamma_0, \delta_0 \rangle = \frac{1}{2} \sum_{\alpha, \beta, \gamma, \delta} (\alpha, \beta | O^{(2)} | \gamma, \delta) \langle \alpha_0, \beta_0 | c_\alpha^\dagger c_\beta^\dagger c_\delta c_\gamma | \gamma_0, \delta_0 \rangle. \quad (1.83)$$

Como $|\alpha_0, \beta_0\rangle = c_{\alpha_0}^\dagger c_{\beta_0}^\dagger |0\rangle$ tenemos que calcular promedios de la forma

$$\langle 0 | c_{\beta_0} c_{\alpha_0} c_\alpha^\dagger c_\beta^\dagger c_\delta c_\gamma c_{\gamma_0}^\dagger c_{\delta_0}^\dagger | 0 \rangle \quad (1.84)$$

lo cual puede realizarse mediante la técnica que discutimos antes, consistente en llevar hacia la derecha a los operadores de destrucción para que actúen sobre el vacío. Esto da

$$\langle 0 | c_{\beta_0} c_{\alpha_0} c_\alpha^\dagger c_\beta^\dagger c_\delta c_\gamma c_{\gamma_0}^\dagger c_{\delta_0}^\dagger | 0 \rangle = [\delta_{\alpha_0, \alpha} \delta_{\beta_0, \beta} \pm \delta_{\alpha_0, \beta} \delta_{\beta_0, \alpha}] [\delta_{\gamma_0, \gamma} \delta_{\delta_0, \delta} \pm \delta_{\gamma_0, \delta} \delta_{\delta_0, \gamma}]. \quad (1.85)$$

El signo $+$ es el habitual para los bosones y el $-$ para los fermiones. Físicamente significa que cuando los operadores de destrucción actúan en la forma

$$c_\delta c_\gamma | \gamma_0, \delta_0 \rangle, \quad (1.86)$$

tienen que destruir las dos partículas en los dos estados cuánticos posibles y así δ tiene que ser uno de los estados y γ el otro con el signo adecuado dependiendo de la (anti)simetría de la función de onda. Usando (1.85) en (1.83) de hecho recuperamos los mismos elementos de matriz que (1.81).

Físicamente, la fórmula (1.82) tiene una interpretación similar a la de los operadores de un solo cuerpo. El término $c_\alpha^\dagger c_\beta^\dagger c_\delta c_\gamma$ destruye dos partículas con los números cuánticos γ y δ , para esto es necesario que el sistema contenga dos partículas (que es lo que debe ocurrir para que un operador de dos cuerpos pueda actuar). Luego recrea las dos partículas con dos nuevos números cuánticos α y β . La amplitud para este proceso está dada por los elementos de matriz del operador $O^{(2)}$ en una transición donde la primera partícula va del estado γ al estado α y la segunda del estado δ al estado β . El elemento de matriz se escribir para kets ordenados (son kets producto y por lo tanto más simples); los operadores de creación y destrucción se encargan de todas las permutaciones y de realizar esta transición para cualquier par de partículas en el sistema.

Ejemplos

La interacción más común entre los electrones es aquella que depende de la distancia entre las dos partículas. Los dos operadores de tal interacción

son, por lo tanto,

$$O^{(2)} = V(\hat{\mathbf{r}}_1 - \hat{\mathbf{r}}_2), \quad (1.87)$$

donde $\hat{\mathbf{r}}_1$ y $\hat{\mathbf{r}}_2$ son los operadores que miden la posición de la primera y la segunda partícula respectivamente. Excepcionalmente utilizaremos aquí la notación con el sombrero para indicar que son operadores. Por ejemplo, para la interacción de Coulomb es

$$V(\mathbf{r}) = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r}, \quad (1.88)$$

pero otros tipos de interacciones como una interacción local $V(\mathbf{r}) = U\delta(\mathbf{r})$ también son opciones posibles. Mantendremos V como función general en lo que sigue.

Para expresar el operador en segunda cuantificación, tenemos nuevamente que realizar la elección de la base. Debido a que el operador $V(\hat{\mathbf{r}}_1 - \hat{\mathbf{r}}_2)$ es diagonal en la base de posición, comencemos con ésta. Usando (1.82) y el hecho de que α es la base de posiciones, obtenemos

$$\begin{aligned} V &= \frac{1}{2} \int d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 d\mathbf{r}_3 d\mathbf{r}_4 (\mathbf{r}_3 \mathbf{r}_4 | V(\hat{\mathbf{r}}_1 - \hat{\mathbf{r}}_2) | \mathbf{r}_1 \mathbf{r}_2) c_{\mathbf{r}_3}^\dagger c_{\mathbf{r}_4}^\dagger c_{\mathbf{r}_2} c_{\mathbf{r}_1}, \\ &= \frac{1}{2} \int d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 d\mathbf{r}_3 d\mathbf{r}_4 V(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) \delta(\mathbf{r}_3 - \mathbf{r}_1) \delta(\mathbf{r}_4 - \mathbf{r}_2) c_{\mathbf{r}_3}^\dagger c_{\mathbf{r}_4}^\dagger c_{\mathbf{r}_2} c_{\mathbf{r}_1}, \quad (1.89) \\ &= \frac{1}{2} \int d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 V(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) c_{\mathbf{r}_1}^\dagger c_{\mathbf{r}_2}^\dagger c_{\mathbf{r}_2} c_{\mathbf{r}_1}. \end{aligned}$$

Si se incluye el espín, la base completa se convierte en $\alpha = (\mathbf{r}, \sigma)$ y como el operador $V(\hat{\mathbf{r}}_1 - \hat{\mathbf{r}}_2)$ es la identidad en el sector de espín, se obtiene

$$V = \frac{1}{2} \sum_{\sigma_1 \sigma_2} \int d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 V(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) c_{\mathbf{r}_1 \sigma_1}^\dagger c_{\mathbf{r}_2 \sigma_2}^\dagger c_{\mathbf{r}_2 \sigma_2} c_{\mathbf{r}_1 \sigma_1}. \quad (1.90)$$

La expresión (1.90) puede escribirse en una forma más familiar utilizando las relaciones de (anti)conmutación para fermiones

$$\begin{aligned} c_{\mathbf{r}_1 \sigma_1}^\dagger c_{\mathbf{r}_2 \sigma_2}^\dagger c_{\mathbf{r}_2 \sigma_2} c_{\mathbf{r}_1 \sigma_1} &= -c_{\mathbf{r}_1 \sigma_1}^\dagger c_{\mathbf{r}_2 \sigma_2}^\dagger c_{\mathbf{r}_1 \sigma_1} c_{\mathbf{r}_2 \sigma_2}, \\ &= -c_{\mathbf{r}_1 \sigma_1}^\dagger (\delta_{\mathbf{r}_1, \sigma_1; \mathbf{r}_2 \sigma_2} - c_{\mathbf{r}_1 \sigma_1} c_{\mathbf{r}_2 \sigma_2}^\dagger) c_{\mathbf{r}_2 \sigma_2}, \\ &= -\delta_{\mathbf{r}_1, \sigma_1; \mathbf{r}_2 \sigma_2} c_{\mathbf{r}_1 \sigma_1}^\dagger c_{\mathbf{r}_2 \sigma_2} + c_{\mathbf{r}_1 \sigma_1}^\dagger c_{\mathbf{r}_1 \sigma_1} c_{\mathbf{r}_2 \sigma_2}^\dagger c_{\mathbf{r}_2 \sigma_2}, \\ &= -\delta_{\mathbf{r}_1, \sigma_1; \mathbf{r}_2 \sigma_2} \rho_{\sigma_1}(\mathbf{r}_1) + \rho_{\sigma_1}(\mathbf{r}_1) \rho_{\sigma_2}(\mathbf{r}_2), \end{aligned} \quad (1.91)$$

(para bosones se obtiene una expresión similar, con signo +). El segundo término da lugar a la expresión

$$V = \frac{1}{2} \sum_{\sigma_1 \sigma_2} \int d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 V(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) \rho_{\sigma_1}(\mathbf{r}_1) \rho_{\sigma_2}(\mathbf{r}_2), \quad (1.92)$$

que es la forma familiar de la interacción entre dos densidades de partículas (o cargas) en dos puntos diferentes. La diferencia es que ahora los ρ son operadores que miden la densidad en lugar de variables clásicas. El primer término se reduce a

$$\sum_{\sigma} \int d\mathbf{r} V(\mathbf{r} = 0) \rho_{\sigma}(\mathbf{r}_1) = V(\mathbf{r} = 0) N, \quad (1.93)$$

que es simplemente un término de potencial químico. Téngase en cuenta que puede ser infinito para algunas interacciones, como la interacción de Coulomb. Este primer término está ahí para corregir el hecho de que la expresión (1.92) contrariamente a (1.90) no contiene solo la interacción entre dos partículas diferentes. Efectivamente, (1.90) tiene dos operadores de destrucción a la derecha, lo que significa que los operadores solo pueden actuar en estados que contienen dos partículas. Por el contrario, (1.92) es de la forma

$$c_{\mathbf{r}_1 \sigma_1}^{\dagger} c_{\mathbf{r}_1 \sigma_1} c_{\mathbf{r}_2 \sigma_2}^{\dagger} c_{\mathbf{r}_2 \sigma_2}, \quad (1.94)$$

y por lo tanto puede actuar incluso si solo hay una partícula en el sistema. Por lo tanto, contiene una falsa “autointeracción” de la partícula consigo misma. Es esta interacción la que conduce al potencial químico (1.93) que debe incluirse adecuadamente junto con (1.92). No obstante, si se fija el número de partículas del sistema, entonces esta modificación es irrelevante ya que simplemente se absorbe en una redefinición del potencial químico y se puede usar (1.90) o (1.92) indistintamente.

Reescribamos ahora la interacción en la base del impulsos. Usando (1.82) y una base $\alpha = (\mathbf{k}, \sigma)$ se tiene

$$V = \frac{1}{2} \sum_{\substack{\mathbf{k}_1 \sigma_1, \mathbf{k}_2 \sigma_2, \\ \mathbf{k}_3 \sigma_3, \mathbf{k}_4 \sigma_4}} (\mathbf{k}_3 \sigma_3, \mathbf{k}_4 \sigma_4 | V(\hat{\mathbf{r}}_1 - \hat{\mathbf{r}}_2) | \mathbf{k}_1 \sigma_1, \mathbf{k}_2 \sigma_2) c_{\mathbf{k}_3 \sigma_3}^{\dagger} c_{\mathbf{k}_4 \sigma_4}^{\dagger} c_{\mathbf{k}_2 \sigma_2} c_{\mathbf{k}_1 \sigma_1}. \quad (1.95)$$

Lo que sigue es calcular un elemento de matriz que involucra operadores de posición en una base de estados de momentos. Esto se realiza, como es habitual en mecánica cuántica, insertando resoluciones de la identidad en el espacio de coordenadas

$$\mathbf{1} = \int d\mathbf{r} |\mathbf{r}\rangle \langle \mathbf{r}|, \quad (1.96)$$

y utilizando la función de onda plana (1.69). Se obtiene

$$V = \frac{1}{2\Omega^2} \sum_{\substack{\sigma_1\sigma_2 \\ \mathbf{k}_1\mathbf{k}_2\mathbf{k}_3\mathbf{k}_4}} \int d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 e^{-i(\mathbf{k}_3\mathbf{r}_1 + \mathbf{k}_4\mathbf{r}_2)} V(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) e^{i(\mathbf{k}_1\mathbf{r}_1 + \mathbf{k}_2\mathbf{r}_2)} \times c_{\mathbf{k}_3\sigma_1}^\dagger c_{\mathbf{k}_4\sigma_2}^\dagger c_{\mathbf{k}_2\sigma_2} c_{\mathbf{k}_1\sigma_1}, \quad (1.97)$$

A continuación aprovechamos que el potencial depende de la diferencia de coordenadas de las dos partículas y cambiamos a las variables de centro de masa $\mathbf{R} = (\mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_2)/2$ y coordenada relativa $\mathbf{r} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2$ para obtener

$$V = \frac{1}{2\Omega^2} \sum_{\substack{\sigma_1\sigma_2 \\ \mathbf{k}_1\mathbf{k}_2\mathbf{k}_3\mathbf{k}_4}} \int d\mathbf{R} e^{i(\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2 - \mathbf{k}_3 - \mathbf{k}_4)\mathbf{R}} \int d\mathbf{r} V(\mathbf{r}) e^{i(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_3 - \mathbf{k}_2 + \mathbf{k}_4)\mathbf{r}/2} \times c_{\mathbf{k}_3\sigma_1}^\dagger c_{\mathbf{k}_4\sigma_2}^\dagger c_{\mathbf{k}_2\sigma_2} c_{\mathbf{k}_1\sigma_1} \quad (1.98)$$

Finalmente, integramos en \mathbf{r} y \mathbf{R} ,

$$V = \frac{1}{2\Omega} \sum_{\substack{\sigma_1\sigma_2 \\ \mathbf{k}_1\mathbf{k}_2\mathbf{k}_3\mathbf{k}_4}} \delta_{\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2, \mathbf{k}_3 + \mathbf{k}_4} V(\mathbf{q} = \mathbf{k}_3 - \mathbf{k}_1) c_{\mathbf{k}_3\sigma_1}^\dagger c_{\mathbf{k}_4\sigma_2}^\dagger c_{\mathbf{k}_2\sigma_2} c_{\mathbf{k}_1\sigma_1}, \quad (1.99)$$

Comentemos brevemente esta expresión. La integración sobre \mathbf{R} da lugar al factor $\delta_{\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2, \mathbf{k}_3 + \mathbf{k}_4}$ que expresa la conservación de los momentos de las dos partículas antes y después de la interacción. Esto es consecuencia directa del hecho de que hemos elegido un potencial de interacción que es invariante frente a traslaciones $V(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)$ y, por lo tanto, el momento total ($\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2$ y $\mathbf{k}_3 + \mathbf{k}_4$) debe conservarse. La integral sobre la coordenada relativa conduce directamente a la transformada de Fourier del potencial de interacción con un vector de onda que corresponde al momento transferido de una a otra de las partículas durante la interacción. Finalmente, se puede reescribir el operador V teniendo en cuenta la restricción $\delta_{\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2, \mathbf{k}_3 + \mathbf{k}_4}$ como

$$V = \frac{1}{2\Omega} \sum_{\substack{\mathbf{k}_1\mathbf{k}_2\mathbf{q} \\ \sigma_1\sigma_2}} V(\mathbf{q}) c_{\mathbf{k}_1 + \mathbf{q}, \sigma_1}^\dagger c_{\mathbf{k}_2 - \mathbf{q}, \sigma_2}^\dagger c_{\mathbf{k}_2\sigma_2} c_{\mathbf{k}_1\sigma_1} \quad (1.100)$$

que se representa gráficamente como se muestra en la figura 1.3

1.2.3. Resolviendo con segunda cuantificación

Ahora que tenemos las herramientas para expresar todos los operadores que necesitamos en segunda cuantificación, ya sea para el Hamiltoniano u otros observables físicos, y que sabemos calcular promedios de un número

Figura 1.3: Visualización pictórica del término (3.97). Cada operador de destrucción está representado por una flecha entrante, cada creación por una saliente. Uno ve que la interacción puede verse como la dispersión de una partícula que va del estado $\mathbf{k}_1\sigma_1$ al $\mathbf{k}_1 + \mathbf{q}, \sigma_1$ por otra que va del estado $\mathbf{k}_2\sigma_2$ al estado $\mathbf{k}_2 - \mathbf{q}, \sigma_2$. La amplitud de estos elementos de matriz es la transformada de Fourier del potencial de interacción $V(\mathbf{q})$. Dado que el potencial es invariable por traslación en el espacio, el impulso se conserva a lo largo de la interacción. Dado que el potencial no depende de los grados de libertad del espín, la interacción conserva individualmente el espín de cada partícula. Esta representación se conoce como diagramas de Feynman. Es extremadamente útil cuando se construye la teoría de la perturbación.

arbitrario de tales operadores de creación y destrucción en el vacío, podemos preguntarnos cómo resolver en la práctica un problema cuando conocemos el Hamiltoniano. En el esquema usual de la mecánica cuántica, escribimos la ecuación de Schrödinger y, a partir de ella, encontramos tanto los autovalores como las autofunciones, pero la esencia misma de la segunda cuantificación es evitar tener que lidiar con la función de onda, por lo que queremos seguir otra ruta para obtener tales cantidades. Cómo hacer esto es lo que examinaremos ahora.

Autovalores y autoestados

Veamos primero si podemos encontrar los valores propios o vectores propios de algún Hamiltoniano simple. Comencemos con un Hamiltoniano cuadrático general

$$H = \sum_{\alpha}^{\Omega} A_{\alpha} c_{\alpha}^{\dagger} c_{\alpha} \quad (1.101)$$

donde α es una base completa y los coeficientes A_{α} son números arbitrarios. Varios Hamiltonianos de sistemas físicos tienen tales formas, por ejemplo, la energía cinética de un sistema de partículas (1.75) y (1.76). Para Hamiltonianos cuadráticos y diagonales de la forma (1.101) el problema está resuelto. De hecho cada vector de p partículas de la forma

$$c_{\alpha_1}^{\dagger} c_{\alpha_2}^{\dagger} c_{\alpha_3}^{\dagger} \dots c_{\alpha_p}^{\dagger} |0\rangle \quad (1.102)$$

es un vector propio de H con autovalor

$$E = \sum_{i=1}^p A_i \quad (1.103)$$

Para mostrar esto, ilustremos el cálculo en un estado de dos fermiones $|\psi\rangle = c_{\alpha_1}^\dagger c_{\alpha_2}^\dagger |0\rangle$ (se puede realizar un cálculo análogo para bosones):

$$\begin{aligned}
 H c_{\alpha_1}^\dagger c_{\alpha_2}^\dagger |0\rangle &= \left(\sum_{\alpha} A_{\alpha} c_{\alpha}^\dagger c_{\alpha} \right) c_{\alpha_1}^\dagger c_{\alpha_2}^\dagger |0\rangle, \\
 &= \sum_{\alpha} A_{\alpha} c_{\alpha}^\dagger (\delta_{\alpha, \alpha_1} - c_{\alpha_1}^\dagger c_{\alpha}) c_{\alpha_2}^\dagger |0\rangle, \\
 &= A_{\alpha_1} |\psi\rangle - \sum_{\alpha} A_{\alpha} c_{\alpha}^\dagger c_{\alpha_1}^\dagger c_{\alpha} c_{\alpha_2}^\dagger |0\rangle, \\
 &= A_{\alpha_1} |\psi\rangle - \sum_{\alpha} A_{\alpha} c_{\alpha}^\dagger c_{\alpha_1}^\dagger (\delta_{\alpha, \alpha_2} - c_{\alpha_2}^\dagger c_{\alpha}) |0\rangle, \\
 &= A_{\alpha_1} |\psi\rangle - A_{\alpha_2} c_{\alpha_2}^\dagger c_{\alpha_1}^\dagger |0\rangle, \\
 &= A_{\alpha_1} |\psi\rangle + A_{\alpha_2} |\psi\rangle.
 \end{aligned} \tag{1.104}$$

La física de este resultado es simple de entender. El operador $n_{\alpha} = c_{\alpha}^\dagger c_{\alpha}$ no es otra cosa que el número de ocupación, y cuenta las partículas en el estado α . Así, si en $|\psi\rangle$ hay una partícula en tal estado devolverá 1 y la energía correspondiente se contará en H .

Así vemos que si tenemos un Hamiltoniano que está en una forma cuadrática diagonal como (1.101) entonces podemos obtener todos los valores propios y vectores propios del sistema. A temperatura cero el estado fundamental consistirá simplemente (para los fermiones) en ocupar todos los estados con la mínima energía posible según el número de partículas en el sistema.

$$|F\rangle = \prod_{i=1}^{\mathcal{N}} c_{\alpha_i}^\dagger |0\rangle, \tag{1.105}$$

si $E_1 \leq E_2 \leq \dots \leq E_{\Omega}$. Nótese que el mar de Fermi (1.54) es un caso particular de (1.105).

Valores de expectación térmicos

A temperatura finita también podemos calcular los promedios de muchos operadores. Un caso importante es el operador que da el número de partículas en el estado α_p

$$\begin{aligned}
\langle c_{\alpha_p}^\dagger c_{\alpha_p} \rangle &= \frac{\text{Tr} \left[e^{-\beta H} c_{\alpha_p}^\dagger c_{\alpha_p} \right]}{\text{Tr} \left[e^{-\beta H} \right]}, \\
&= \frac{\sum_{n_1, \dots, n_\Omega} \langle n_1, \dots, n_\Omega | e^{-\beta \sum_\alpha A_\alpha c_\alpha^\dagger c_\alpha} c_{\alpha_p}^\dagger c_{\alpha_p} | n_1, \dots, n_\Omega \rangle}{\sum_{n_1, \dots, n_\Omega} \langle n_1, \dots, n_\Omega | e^{-\beta \sum_\alpha A_\alpha c_\alpha^\dagger c_\alpha} | n_1, \dots, n_\Omega \rangle}.
\end{aligned} \tag{1.106}$$

Usando el hecho de que (tanto para fermiones como para bosones) $[c_\alpha^\dagger c_\alpha, c_\gamma] = 0$ si $\alpha \neq \gamma$ y una relación similar para c_γ^\dagger , vemos que el término $e^{-\beta H}$ se factoriza en la forma

$$e^{-\beta H} = \prod_{j=1}^{\Omega} e^{-\beta A_{\alpha_j} c_{\alpha_j}^\dagger c_{\alpha_j}}. \tag{1.107}$$

Como en la traza cada término n_i es independiente, la media también se factoriza, y el numerador se convierte en

$$\left(\sum_{n_{\alpha_p}} \langle n_{\alpha_p} | e^{-\beta A_{\alpha_p} c_{\alpha_p}^\dagger c_{\alpha_p}} c_{\alpha_p}^\dagger c_{\alpha_p} | n_{\alpha_p} \rangle \right) \prod_{j \neq p} \left(\sum_{n_{\alpha_j}} \langle n_{\alpha_j} | e^{-\beta A_{\alpha_j} c_{\alpha_j}^\dagger c_{\alpha_j}} | n_{\alpha_j} \rangle \right). \tag{1.108}$$

Todos los términos con $j \neq p$ son idénticos en el numerador y el denominador y se cancelan entre sí. La traza se reduce entonces a

$$\langle c_{\alpha_p}^\dagger c_{\alpha_p} \rangle = \frac{\sum_{n_{\alpha_p}} \langle n_{\alpha_p} | e^{-\beta A_{\alpha_p} c_{\alpha_p}^\dagger c_{\alpha_p}} c_{\alpha_p}^\dagger c_{\alpha_p} | n_{\alpha_p} \rangle}{\sum_{n_{\alpha_p}} \langle n_{\alpha_p} | e^{-\beta A_{\alpha_p} c_{\alpha_p}^\dagger c_{\alpha_p}} | n_{\alpha_p} \rangle}, \tag{1.109}$$

lo cual es bastante obvio físicamente. De hecho, dado que el Hamiltoniano es diagonal en α , sólo el estado α_p puede contribuir al promedio de un operador que solo involucra al estado α_p . Como $c_{\alpha_p}^\dagger c_{\alpha_p} | n_p \rangle = n_p | n_p \rangle$ simplemente obtenemos

$$\langle c_{\alpha_p}^\dagger c_{\alpha_p} \rangle = \frac{\sum_{n_{\alpha_p}} e^{-\beta A_{\alpha_p} n_p} n_p}{\sum_{n_{\alpha_p}} e^{-\beta A_{\alpha_p} n_p}}. \tag{1.110}$$

Hasta ahora todo lo que hicimos es independiente de tener bosones o fermiones. Sin embargo, el resultado final dependerá de cuáles sean los valores permitidos de n_p . Para fermiones solo $n_p = 0$ y $n_p = 1$ están en la suma, y de este modo

$$\langle c_{\alpha_p}^\dagger c_{\alpha_p} \rangle = \frac{e^{-\beta A_{\alpha_p}}}{1 + e^{-\beta A_{\alpha_p}}} = \frac{1}{1 + e^{\beta A_{\alpha_p}}}, \tag{1.111}$$

y se recupera el factor de Fermi. Vemos que este es un resultado totalmente general (no limitado a autoestados del impulso) para Hamiltonianos bilineales y se está en equilibrio térmico.

Para bosones $n_p = 0, \dots, +\infty$, y así la suma se convierte en

$$\begin{aligned}
 \langle c_{\alpha_p}^\dagger c_{\alpha_p} \rangle &= -\frac{\partial}{\partial \beta} \log \left[\sum_{n_p=0}^{+\infty} e^{-\beta n_p A_{\alpha_p}} \right], \\
 &= -\frac{\partial}{\partial \beta} \log \left[\frac{1}{1 - e^{-\beta A_{\alpha_p}}} \right], \\
 &= \frac{e^{-\beta A_{\alpha_p}}}{1 - e^{-\beta A_{\alpha_p}}}, \\
 &= \frac{1}{e^{\beta A_{\alpha_p}} - 1},
 \end{aligned} \tag{1.112}$$

y se recupera el factor de Bose.

Transformaciones canónicas

Con Hamiltonianos cuadráticos diagonales podemos calcular entonces esencialmente cualquier valor de expectación o cantidad física que se necesite. Por supuesto, en general, el Hamiltoniano del sistema no será ni cuadrático ni diagonal. Entonces, resolver en segunda cuantificación significa esencialmente que tenemos que encontrar una transformación de los operadores c y c^\dagger que lleven al Hamiltoniano en una forma diagonal cuadrática. Aunque en principio cualquier transformación es posible, no todas las son buenas. Queremos que los nuevos operadores d y d^\dagger que son los resultados de la transformación sigan generando el espacio Fock. Significa que sólo podemos considerar transformaciones que conserven las relaciones canónicas de conmutación. Por supuesto, encontrar tales transformaciones es, en general, una tarea formidable. Sin embargo, hay una clase muy importante de transformaciones cuando el Hamiltoniano sigue siendo una forma cuadrática, pero no diagonal, que examinaremos en la siguiente sección.

Antes de hacerlo, comentemos finalmente que incluso sin resolver el Hamiltoniano se puede explotar la libertad de elegir diferentes operadores de creación y destrucción para usar una representación más conveniente. Como ya se mencionó, se permite toda transformación que conserve las relaciones canónicas de conmutación. Pongamos un ejemplo sencillo, se verán más ejemplos en la siguiente sección. La transformación más simple es la transformación partícula-agujero.

$$\begin{aligned}
 c_\alpha^\dagger &= d_\alpha, \\
 c_\alpha &= d_\alpha^\dagger.
 \end{aligned} \tag{1.113}$$

Para los fermiones es fácil comprobar, por sustitución de los operadores d verifican las relaciones canónicas de anticonmutación. Por ejemplo

$$[d_\alpha, d_\beta^\dagger]_+ = [c_\alpha^\dagger, c_\beta]_+ = \delta_{\alpha,\beta}. \quad (1.114)$$

Si los operadores c_α y c_α^\dagger respectivamente destruyen y crean un electrón en el estado α , el operador d_α y d_α^\dagger también son operadores de destrucción y creación de “algo más”, que también tiene una estadística fermiónica y por lo tanto, se puede utilizar para construir un espacio de Fock. En ese caso particular, el operador d_α destruye un hueco en el estado α (que es idéntico a crear un electrón) y el operador d_α^\dagger crea un hueco (que es lo mismo que destruir un electrón).

Un punto importante al hacer la transformación es no olvidar modificar también el vacío. De hecho, el vacío de las partículas d no es el mismo que el vacío de las partículas c . Se tiene así $|0_c\rangle$ y $|0_d\rangle$. El vacío de las partículas d se define como siempre por

$$d_\alpha |0_d\rangle = 0,$$

para todos los estados α . Es fácil comprobar usando la relación (1.113) que

$$|0_d\rangle = \prod_\alpha c_\alpha^\dagger |0_c\rangle.$$

Destruir una partícula d sobre este vacío es equivalente a crear una de tipo c . Pero esto no es posible, porque todos los estados están ocupados.

Más generalmente, consideremos un Hamiltoniano cuadrático, no diagonal, arbitrario:

$$H = \sum_{i,j=1}^{N_s} c_i^\dagger A_{ij} c_j \quad (1.115)$$

donde A_{ij} son los elementos de una matriz hermítica \mathbf{A} , y N_s es un número del orden del volumen del sistema, Ω , que especifica la cantidad de estados accesibles de partícula independiente. Para simplificar la notación conviene escribir en forma matricial:

$$H = \mathbf{c}^\dagger \mathbf{A} \mathbf{c} \quad (1.116)$$

donde

$$\mathbf{c} = \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \vdots \\ c_{N_s} \end{pmatrix}, \quad \mathbf{c}^\dagger = (c_1^\dagger \quad c_2^\dagger \quad \cdots \quad c_{N_s}^\dagger) \quad (1.117)$$

es un vector de N_s elementos, donde cada elemento es un operador de creación, y su transpuesto conjugado. Obsérvese que hemos introducido la notación con una barra sobre \mathbf{c} para indicar la operación de transposición sobre el

vector en conjunto con el dagado de sus elementos. La utilidad de esta notación quedará más clara en la próxima sección. La matriz \mathbf{A} , al ser hermítica, puede ser diagonalizada por una matriz unitaria \mathbf{U} ,

$$\mathbf{U}^\dagger \mathbf{A} \mathbf{U} = \tilde{\mathbf{A}} \quad (1.118)$$

donde $\tilde{\mathbf{A}}$ es la matriz diagonal que contiene a los autovalores de \mathbf{A} , A_1, \dots, A_{N_s} y \mathbf{U} se construye ordenando los autovectores de \mathbf{A} en columnas. Una vez hallada la matriz \mathbf{U} , podemos utilizarla para definir un nuevo conjunto de operadores d_α mediante la transformación

$$\mathbf{d} = \mathbf{U}^\dagger \mathbf{c}, \quad (\text{en componentes, } d_\alpha = \sum_{k=1}^{N_s} U_{i\alpha}^* c_i) \quad (1.119)$$

de manera tal que el Hamiltoniano, expresado en términos de los d resulta

$$H = \mathbf{d}^\dagger \mathbf{U}^\dagger \mathbf{A} \mathbf{U} \mathbf{d} = \mathbf{d}^\dagger \tilde{\mathbf{A}} \mathbf{d} = \sum_{\alpha} A_{\alpha} d_{\alpha}^{\dagger} d_{\alpha}. \quad (1.120)$$

Es decir, resulta ser de la forma diagonal (1.101).

Una condición importante para que esto funcione es que la transformación (1.119) conserve los anticonmutadores entre d , que es el caso debido a su unitariedad, ya que

$$[d_{\alpha}^{\dagger}, d_{\beta}]_{+} = \sum_{ij} U_{i\alpha} U_{\beta j}^{\dagger} [c_i^{\dagger}, c_j]_{+} = \sum_j U_{j\alpha} U_{\beta j}^{\dagger} = (\mathbf{U}^{\dagger} \mathbf{U})_{\beta\alpha} = \delta_{\alpha\beta}. \quad (1.121)$$

Una vez hallada la forma diagonal (1.120), el estado fundamental de \mathcal{N} partículas está dado por (1.105)

$$|\mathbf{F}\rangle = \prod_{\alpha=1}^{\mathcal{N}} d_{\alpha}^{\dagger} |0_d\rangle \quad (1.122)$$

donde $|0_d\rangle$ es el estado de vacío de los operadores d , que satisface

$$d_{\alpha} |0_d\rangle = 0 \quad \forall \alpha. \quad (1.123)$$

Para este tipo de transformación, el vacío resulta invariante, es decir $|0_c\rangle = |0_d\rangle$. En efecto, debido a que los d están linealmente relacionados a los c , si aplicamos algún d_{α} sobre $|0_c\rangle$, encontramos

$$d_{\alpha} |0_c\rangle = \sum_j U_{\alpha j}^{\dagger} c_j |0_c\rangle = 0, \quad (1.124)$$

y viceversa, si aplicamos c_j sobre $|0_d\rangle$ también se anula, utilizando la transformación inversa.

Por supuesto, en general, la matriz $A_{\alpha\beta}$ es de tamaño $N_s \times N_s$ y la diagonalización será muy difícil de realizar analíticamente. Sin embargo, hay casos simples donde puede hacerse. En especial, obsérvese que la transformada de Fourier (1.71), utilizada para relacionar la base de coordenadas, donde la energía cinética de los electrones en una caja es no diagonal, con la base de momentos, donde sí lo es, es un ejemplo de tal transformación unitaria.

Ejemplo: Modelo tight binding

Veamos otro modelo que puede resolverse mediante este tipo de transformaciones: el Hamiltoniano de ligadura fuerte o *tight-binding* (??). Adicionalmente, esto nos permitirá escribir este Hamiltoniano en segunda cuantificación. Los estados en cada sitio $|i\rangle$ proporcionan una base completa y, por lo tanto, podemos definir los operadores de creación y destrucción asociados con él, es decir, c_i^\dagger es el operador que crea una partícula en el sitio i . Estos son los análogos a los c_r^\dagger utilizados al estudiar operadores de un cuerpo, sólo que en un espacio discreto. La expresión en segunda cuantificación de H se escribe

$$H = \sum_{i,j} \langle i | H^{(1)} | j \rangle c_i^\dagger c_j, \quad (1.125)$$

donde $H^{(1)}$ es el Hamiltoniano (??). Obtenemos así

$$H = \epsilon \sum_i c_i^\dagger c_i - t \sum_{\langle i,j \rangle} c_i^\dagger c_j. \quad (1.126)$$

El segundo término describe un proceso en el que una partícula en el sitio i reaparece en el sitio vecino j y viceversa. Si bien es posible hacer todo este análisis en dimensión arbitraria, para simplificar la diagonalización partición supondremos que los sitios electrónicos se acomodan en un anillo, e identifiquemos el sitio en la posición $N_s + 1$ con el sitio 1, es decir, introducimos un operador de destrucción fermiónico adicional

$$c_{N_s+1} \equiv c_1, \quad (1.127)$$

y su complejo conjugado. Este Hamiltoniano es obviamente cuadrático pero no diagonal. En el lenguaje de (1.115) corresponde a una matriz tridiagonal. Para diagonalizarla, primero pensamos en la física del problema: dado que el Hamiltoniano es invariante frente a traslaciones, el momento debe ser un buen número cuántico, y vamos utilizar entonces una combinación lineal de operadores de creación y destrucción c_i que corresponden a su transformada de Fourier. Este es exactamente el mismo razonamiento que el que conduce a (1.71), sólo que ahora utilizaremos una transformada de Fourier discreta

[véase el apéndice 1.3]. Tratados simplemente como una combinación lineal de operadores, podemos definir

$$d_k^\dagger = \frac{1}{\sqrt{N_s}} \sum_{j=0}^{N_s-1} e^{ikr_j} c_j^\dagger, \quad (1.128)$$

donde hemos usado un nombre diferente d para enfatizar que se trata de nuevos operadores, e introducido las posiciones $r_j = aj$ donde a es la constante de red, y

$$k = \frac{2\pi n_k}{N_s a}, \quad n_k \in \mathbb{Z}. \quad (1.129)$$

Se puede comprobar inmediatamente que los operadores d_k cumplen las reglas canónicas de conmutación. Verifiquemos uno de los anticonmutadores y dejemos las otras relaciones como ejercicio:

$$\begin{aligned} [d_k, d_q^\dagger]_+ &= \frac{1}{N_s} \sum_{ij} e^{-ikr_i} e^{iqr_j} [c_i, c_j^\dagger]_+, \\ &= \frac{1}{N_s} \sum_{ij} e^{-ikr_i} e^{iqr_j} \delta_{ij}, \\ &= \frac{1}{N_s} \sum_j e^{i(k-q)r_j}, \\ &= \delta_{kq}. \end{aligned} \quad (1.130)$$

Los operadores d_k son, por lo tanto, buenos operadores de Fermiones. Hay exactamente N_s operadores diferentes (el tamaño del espacio de Hilbert no puede cambiar) y k está confinado dentro de la primera zona de Brillouin $k \in [-\pi/a, \pi/a]$ como se discutió para la solución en primera cuantificación. Además, como resulta obvio de la definición (1.128), $|0_d\rangle = |0_c\rangle$. La transformación (1.128) se invierte fácilmente

$$c_j^\dagger = \frac{1}{\sqrt{N_s}} \sum_k e^{-ikr_j} d_k^\dagger, \quad (1.131)$$

y así, reemplazando los c_j en (1.126) y haciendo un poco de álgebra, se encuentra

$$H = \epsilon \sum_k d_k^\dagger d_k - \sum_k 2t \cos(ka) d_k^\dagger d_k. \quad (1.132)$$

Ahora que el Hamiltoniano es diagonal, podemos usar los operadores d_k para obtener el estado fundamental y los diversos promedios. A nivel físico, hemos utilizado que, dado que la cantidad de movimiento se conserva, se pueden

diagonalizar simultáneamente los operadores de impulso y el Hamiltoniano. Por lo tanto, el Hamiltoniano es una matriz diagonal por bloques en la base a los autovectores del operador impulso. Como esta base es de tamaño N_s (N_s diferentes k valores en la primera zona de Brillouin) nos queda para cada valor de k una matriz de 1×1 a diagonalizar, con lo cual el problema está completamente resuelto.

Términos anómalos

Estudiemos ahora un Hamiltoniano más general, que incluya términos de la forma $c^i c_j$. Este tipo de términos se denominan anómalos, y hacen que en el Hamiltoniano no conmute con el operador N y por lo tanto no conserve el número de partículas, y por lo tanto no tiene una expresión simple en primera cuantificación. Típicamente aparecen cuando uno considera teorías para superconductividad, tales como el llamado Hamiltoniano de Bardeen-Cooper-Schrieffer (BCS) que estudiaremos más adelante. Consideremos el Hamiltoniano

$$H = \sum_{ij=1}^{N_s} c_i^\dagger A_{ij} c_j + \frac{1}{2} \sum_{ij=1}^{N_s} c_i B_{ij} c_j + \text{h.c.} \quad (1.133)$$

siendo $i, j = 1, \dots, N_s$, \mathbf{A} una matriz hermítica ($\mathbf{A}^\dagger = \mathbf{A}$), y \mathbf{B} una matriz antisimétrica ($\mathbf{B}^t = -\mathbf{B}$), ambas condiciones impuestas por la necesidad de que H sea un operador hermítico en conjunto con la estadística fermiónica. Para escribirlo en forma matricial, debemos considerar ahora que existen estos dos tipos de términos. Si buscamos utilizar una sola matriz, no será posible que su dimensión sea N_s . La forma usual de hacerlo consiste en introducir la notación de Nambu, en la cual se define un vector o spinor de Nambu de dimensión $2N_s$ cuyos elementos son tanto los operadores de creación como de destrucción:

$$\Psi^\dagger = \left(c_1^\dagger \quad \dots \quad c_{N_s}^\dagger \quad c_1 \quad \dots \quad c_{N_s} \right) \quad (1.134)$$

en conjunto con la matriz

$$\mathbf{H} = \begin{pmatrix} \mathbf{A} & -\mathbf{B}^* \\ \mathbf{B} & -\mathbf{A}^* \end{pmatrix}, \quad (1.135)$$

que se conoce como Hamiltoniano de Bogoliubov-de Gennes. Con estas definiciones el Hamiltoniano se escribe

$$H = \frac{1}{2} \Psi^\dagger \mathbf{H} \Psi + E_0 \quad (1.136)$$

dónde

$$E_0 = -\frac{1}{2} \text{tr } \mathbf{A}, \quad (1.137)$$

Obsérvese que a matriz \mathbf{H} continúa siendo hermítica (para mostrarlo es importante la antisimetría de \mathbf{B}) y por lo tanto diagonalizable mediante una transformación unitaria \mathbf{M} de $2N_s \times 2N_s$, de manera similar a como lo realizamos en la sección anterior, de manera tal que

$$\mathbf{M}^\dagger \mathbf{H} \mathbf{M} = \tilde{\mathbf{H}} = \text{diag}(\Lambda_1, \dots, \Lambda_{N_s}, \bar{\Lambda}_1, \dots, \bar{\Lambda}_{N_s}), \quad (1.138)$$

donde Λ_α y $\bar{\Lambda}_\alpha$ son los autovalores de \mathbf{H} . El spinor transformado Φ se relaciona con el sin transformar a través de \mathbf{M} :

$$\Phi = \mathbf{M}\Psi, \quad (1.139)$$

Y entonces el Hamiltoniano, en términos de los nuevos operadores, resulta

$$H = \frac{1}{2} \Phi^\dagger \mathbf{M}^\dagger \mathbf{H} \mathbf{M} \Phi = \frac{1}{2} \Phi^\dagger \tilde{\mathbf{H}} \Phi \quad (1.140)$$

Si escribimos al vector Φ en términos de un nuevo conjunto de operadores η_α, ξ_α en la forma

$$\Phi^\dagger = \left(\eta_1^\dagger \quad \cdots \quad \eta_{N_s}^\dagger \quad \xi_1^\dagger \quad \cdots \quad \xi_{N_s}^\dagger \right). \quad (1.141)$$

el Hamiltoniano se escribe

$$H = \frac{1}{2} \sum_{\alpha=1}^{N_s} \Lambda_\alpha \eta_\alpha^\dagger \eta_\alpha + \frac{1}{2} \sum_{\alpha=1}^{N_s} \bar{\Lambda}_\alpha \xi_\alpha^\dagger \xi_\alpha \quad (1.142)$$

Al ser unitaria, la transformación \mathbf{M} preserva los conmutadores y es por lo tanto canónica, pero observemos que ahora la transformación mezcla a los operadores de creación y destrucción.

La forma (1.142) del Hamiltoniano posee dos términos y a simple vista daría la impresión de que como consecuencia de la existencia de términos anómalos debimos duplicar el número de grados de libertad. Veamos que esto es sólo así en apariencia.

Observemos que \mathbf{H} satisface la relación

$$\mathbf{H} = -\sigma_x \mathbf{H}^* \sigma_x, \quad (1.143)$$

donde la matriz de Pauli σ_x actúa sobre la estructura de Nambu (1.135), de 2×2 . Esta transformación constituye una simetría de \mathbf{H} , y resulta ser antiunitaria⁴. La transformación (1.143) no es más que la simetría partícula-hueco. Esto implica que si ψ es un autoestado de \mathbf{H} con autovalor λ ,

$$\mathbf{H}\psi = \lambda\psi,$$

⁴Una transformación antiunitaria K entre vectores $|x\rangle, |y\rangle$ de un espacio de Hilbert ($|y\rangle = K|x\rangle$) es un operador antilineal (es decir, tal que $K(a|x\rangle + b|y\rangle) = a^*K|x\rangle + b^*K|y\rangle$)

entonces ψ^* es autoestado de \mathbf{H}^* con el mismo autovalor (que es real, dado que \mathbf{H} es hermítico):

$$\mathbf{H}^*\psi^* = \lambda\psi^*$$

y entonces el vector $\psi' = \sigma_x\psi^*$ también es vector de \mathbf{H} con autovalor $-\lambda$:

$$\mathbf{H}\psi' = \mathbf{H}\sigma_x\psi^* = -\sigma_x\mathbf{H}^*\sigma_x\psi^* = -\sigma_x\mathbf{H}^*\psi^* = -\lambda\sigma_x\psi^* = -\lambda\psi'.$$

Dado que son vectores distintos, de otro modo tendrían distinto autovalor (a menos que $\lambda = 0$), si escribimos al autovector en la forma

$$\psi = \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix}$$

donde u y v son vectores columna de N_s elementos, entonces

$$\psi' = \begin{pmatrix} v^* \\ u^* \end{pmatrix}$$

La matriz \mathbf{M} , que posee los autovectores en columnas, posee entonces la forma

$$\mathbf{M} = \begin{pmatrix} u & v^* \\ v & u^* \end{pmatrix}, \quad (1.146)$$

donde u y v son matrices de $N_s \times N_s$. En otras palabras, la forma (1.146) es consecuencia de la simetría partícula-hueco de \mathbf{H} , ec. (1.143). Los autovalores $\bar{\Lambda}_\alpha$ puede tomarse como $\bar{\Lambda}_\alpha = -\Lambda_\alpha$ y la forma diagonal de la matriz de autovalores se escribe entonces

$$\tilde{\mathbf{H}} = \text{diag}(\Lambda_1, \dots, \Lambda_{N_s}, -\Lambda_1, \dots, -\Lambda_{N_s}), \quad (1.147)$$

donde Λ_α son todos positivos. Observemos además la transformación (1.139) se escribe explícitamente

$$\eta_i = u_{ij}c_j + v_{ij}^*c_j^\dagger, \quad (1.148)$$

$$\xi_i = v_{ij}c_j + u_{ij}^*c_j^\dagger, \quad (1.149)$$

con $a, b \in \mathbb{C}$) tal que transforma el producto escalar en el producto escalar conjugado:

$$\langle x|K^\dagger K|y\rangle = \langle x|y\rangle^*. \quad (1.144)$$

Este tipo de operadores, al igual que los operadores unitarios, no cambia el resultado de una medida, es decir que

$$|\langle x|K^\dagger K|y\rangle|^2 = |\langle x|y\rangle|^2. \quad (1.145)$$

pero entonces ξ_i no es más que el adjunto de η_i , $\xi_i = \eta_i^\dagger$, y el Hamiltoniano se escribe

$$H = \sum_{j=1}^{N_s} \Lambda_j \eta_j^\dagger \eta_j + \text{Const.} \quad (1.150)$$

De modo que sólo tenemos N_s grados de libertad, como se esperaba físicamente. Para diagonalizar el Hamiltoniano debimos duplicar el número de grados de libertad introduciendo huecos, pero vimos que esta duplicación es espuria. Sin embargo, en determinadas circunstancias puede ser útil mantener la duplicación, pero en ese caso debe recordarse que el par de niveles con energía $\pm\Lambda_j$ no corresponde a dos estados cuánticos distintos, sino a uno solo, que es una superposición coherente de electrones y huecos —una cuasipartícula de Bogoliubov, el bogoliubon: tiene una energía de excitación Λ_j , y es creada por el operador $\eta_j^\dagger = u_{ij}c_j + v_{ij}c_j^*$. Llenar el estado asociado en energía $-\Lambda_j$ es equivalente a vaciar el estado de energía positiva.

El Hamiltoniano (1.133) no conserva el número de partículas, ya que no conmuta con $N = \sum_j c_j^\dagger c_j$, aunque conserva el número de cuasipartículas, $M = \sum_j \eta_j^\dagger \eta_j$. Como consecuencia de que la transformación \mathbf{M} mezcla operadores c_j y c_j^\dagger el vacío no es invariante, tenemos un vacío $|0_c\rangle$ que satisface $c_j|0_c\rangle = 0$, y un vacío $|0_\eta\rangle$ que verifica $\eta_j|0_\eta\rangle = 0$. Encontrar la relación entre ambos puede ser complicado y depende de la forma de A y B . Lo haremos en el caso específico del modelo BCS más adelante. Una vez determinado $|0_\eta\rangle$, el estado fundamental de \mathcal{M} cuasipartículas se escribe como un mar de Fermi de bogoliubones:

$$|F\rangle = \prod_j^{\mathcal{M}} \eta_j^\dagger |0_\eta\rangle. \quad (1.151)$$

Si bien el número de partículas no es una cantidad conservada, el operador de paridad global,

$$P = (-1)^N = e^{i\pi N} \quad (1.152)$$

conmuta con H , y por lo tanto los autoestados de energía poseen paridad fermiónica definida ± 1 .

1.3. Apéndice: Transformada de Fourier discreta

Consideremos una función $f : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$, definida sólo en un número finito n de puntos x_j , $j = 0, \dots, n-1$, tal que $f_j = f(x_j)$. En tal caso es posible

definir una transformada discreta de Fourier \tilde{f}_k de la siguiente forma:

$$\tilde{f}_k = \frac{1}{\sqrt{n}} \sum_{j=0}^{n-1} f_j e^{-2\pi i j k / n}, \quad k = 0, \dots, n-1.$$

Conocidos los n valores \tilde{f}_k , los n valores f_j pueden recuperarse exactamente mediante la transformación inversa, dada por

$$f_j = \frac{1}{\sqrt{n}} \sum_{k=0}^{n-1} \tilde{f}_k e^{2\pi i j k / n}, \quad j = 0, \dots, n-1$$

Esto puede demostrarse fácilmente, reemplazando \tilde{f}_k por su definición:

$$\frac{1}{\sqrt{n}} \sum_{k=0}^{n-1} \left[\frac{1}{\sqrt{n}} \sum_{j'=0}^{n-1} f_{j'} e^{-2\pi i j' k / n} \right] e^{2\pi i j k / n} = \sum_{j'=0}^{n-1} f_{j'} \left[\frac{1}{n} \sum_{k=0}^{n-1} e^{2\pi i k (j-j')} \right] = f_j$$

donde hemos utilizado el resultado

$$\frac{1}{n} \sum_{k=0}^{n-1} e^{2\pi i k (j-j') / n} = \delta_{jj'} = \begin{cases} 1 & j = j' \\ 0 & j \neq j' \end{cases}$$

válido para j, j' enteros. En efecto, si $j = j'$, $e^{2\pi i k (j-j') / n} = 1$ y

$$\sum_{k=0}^{n-1} e^{2\pi i k (j-j') / n} = n,$$

mientras que si $j \neq j'$ (y $|j - j'| < n$)

$$\sum_{k=0}^{n-1} e^{2\pi i k (j-j') / n} = \frac{1 - e^{2\pi i (j-j')}}{1 - e^{2\pi i (j-j') / n}} = 0$$

para $j - j'$ entero.

Bibliografía