

# Segunda cuantización

Prof. Alberto Camjayi

# Introducción

## Cuantización [Bruus]

Históricamente, lo primero en cuantizarse fueron las variables dinámicas de las partículas, dejando los campos electromagnéticos clásicos (Heisenberg, Schrödinger y Dirac, 1925-26).

A continuación, los campos electromagnéticos se cuantizaron (Dirac, 1927) e incluso las partículas se representaron por campos cuánticos (Jordan y Wigner, 1928).

Por convención, la forma original de la mecánica cuántica se denomina “primera cuantización”, mientras las teorías cuánticas de campos se formulan en el lenguaje de “segunda cuantización”.

# Primera cuantización

## Sistema de muchas partícula

En un sistema compuesto por  $N$  partículas idénticas, la función de onda depende de las  $3N$  coordenadas y de los  $N$  espines. La misma es interpretada como la amplitud de probabilidad de encontrar las partículas en una dada configuración de espines, en el volumen infinitesimal alrededor de punto en el espacio de configuración donde esta evaluada:

$$\text{Prob} = |\psi(\mathbf{r}_1\sigma_1, \dots, \mathbf{r}_N\sigma_N)|^2 \prod_{j=1}^N d\mathbf{r}_j$$

# Primera cuantización

## Partículas indistinguibles

Además de la generalización natural de la función de onda, un segundo hecho fundamental debe ser incorporado: en física cuántica las partículas idénticas son *indistinguibles*.

Esto impone una simetría en la función de onda de  $N$  partículas frente a las permutaciones de las coordenadas:

- Bosones:

$$\psi(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_j, \dots, \mathbf{r}_k, \dots, \mathbf{r}_N) = +\psi(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_k, \dots, \mathbf{r}_j, \dots, \mathbf{r}_N)$$

- Fermiones:

$$\psi(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_j, \dots, \mathbf{r}_k, \dots, \mathbf{r}_N) = -\psi(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_k, \dots, \mathbf{r}_j, \dots, \mathbf{r}_N)$$

# Primera cuantización

## Base de funciones de una partícula

La base para representar los estados de  $N$  partículas se puede construir a partir de cualquier base completa de funciones de onda de una partícula.

$$\sum_{\nu} \psi_{\nu}^*(\mathbf{r}') \psi_{\nu}(\mathbf{r}) = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \quad \int d\mathbf{r} \psi_{\nu}^*(\mathbf{r}) \psi_{\nu'}(\mathbf{r}) = \delta_{\nu, \nu'}$$

Empezando por la función de onda de  $N$  partículas, la podemos proyectar sobre una de las funciones de la base.

# Primera cuantización

## Base de funciones de una partícula

La base para representar los estados de  $N$  partículas se puede construir a partir de cualquier base completa de funciones de onda de una partícula.

Empezando por la función de onda de  $N$  partículas, la podemos proyectar sobre una de las funciones de la base,

$$A_{\nu_1}(\mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N) \equiv \int d\mathbf{r}_1 \psi_{\nu_1}^*(\mathbf{r}_1) \psi(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N).$$

Podemos invertirla usando completitud:

$$\sum_{\nu_1} \psi_{\nu_1}(\mathbf{r}'_1) A_{\nu_1}(\mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N) = \psi(\mathbf{r}'_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N).$$

# Primera cuantización

## Base de funciones de una partícula

La base para representar los estados de  $N$  partículas se puede construir a partir de cualquier base completa de funciones de onda de una partícula.

El proceso se puede iterar:

$$A_{\nu_1, \nu_2}(\mathbf{r}_3, \dots, \mathbf{r}_N) = \int d\mathbf{r}_2 \psi_{\nu_2}^*(\mathbf{r}_2) A_{\nu_1}(\mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N),$$

e invertir nuevamente

$$\sum_{\nu_1, \nu_2} \psi_{\nu_1}(\mathbf{r}'_1) \psi_{\nu_2}(\mathbf{r}'_2) A_{\nu_1, \nu_2}(\mathbf{r}_3, \dots, \mathbf{r}_N) = \psi(\mathbf{r}'_1, \mathbf{r}'_2, \dots, \mathbf{r}_N).$$

# Primera cuantización

## Base de funciones de una partícula

La base para representar los estados de  $N$  partículas se puede construir a partir de cualquier base completa de funciones de onda de una partícula.

Finalmente, obtendremos:

$$\psi(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N) = \sum_{\nu_1, \dots, \nu_N} A_{\nu_1, \dots, \nu_N} \psi_{\nu_1}(\mathbf{r}_1) \psi_{\nu_2}(\mathbf{r}_2) \dots \psi_{\nu_N}(\mathbf{r}_N),$$

donde los coeficientes son números complejos.

***Así cualquier función de muchas partículas se puede escribir como una superposición (complicada) de estados producto de  $N$  funciones de una partícula.***

# Primera cuantización

## Base de funciones de una partícula

Si bien la base de estados producto es tan válida como cualquier otra, no resulta muy útil para imponer la simetría de partículas idénticas.

Todos los requerimientos para garantizar la simetría deben estar incluidos en los coeficientes recién deducidos.

Una manera más inteligente de dar cuenta de la simetría, es introducir los operadores de simetrización ( $\hat{S}_+$ ) para los bosones y de anti-simetrización ( $\hat{S}_-$ ) para los fermiones.

# Primera cuantización

## Base de funciones de una partícula

Para fermiones el operador toma la forma de un determinante y para los bosones de un permanente (determinante sin signo):

$$\hat{S}_{\pm} \prod_{j=1}^N \psi_{\nu_j}(\mathbf{r}_j) = \begin{vmatrix} \psi_{\nu_1}(\mathbf{r}_1) & \psi_{\nu_1}(\mathbf{r}_2) & \cdots & \psi_{\nu_1}(\mathbf{r}_N) \\ \psi_{\nu_2}(\mathbf{r}_1) & \psi_{\nu_2}(\mathbf{r}_2) & \cdots & \psi_{\nu_2}(\mathbf{r}_N) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \psi_{\nu_N}(\mathbf{r}_1) & \psi_{\nu_N}(\mathbf{r}_2) & \cdots & \psi_{\nu_N}(\mathbf{r}_N) \end{vmatrix}_{\pm}$$

# Primera cuantización

## Base de funciones de una partícula

Para fermiones el operador toma la forma de un determinante y para los bosones de un permanente (determinante sin signo):

$$\hat{S}_+ \prod_{j=1}^N \psi_{\nu_j}(\mathbf{r}_j) = \sum_{p \in S_N} \left( \prod_{j=1}^N \psi_{\nu_j}(\mathbf{r}_{p(j)}) \right) \quad (\text{bosones})$$

$$\hat{S}_- \prod_{j=1}^N \psi_{\nu_j}(\mathbf{r}_j) = \sum_{p \in S_N} \left( \prod_{j=1}^N \psi_{\nu_j}(\mathbf{r}_{p(j)}) \right) \text{sign}(p) \quad (\text{fermiones})$$

donde  $S_N$  es el grupo de las  $N!$  permutaciones en las coordenadas.

# Primera cuantización

## Base de funciones de una partícula

Para fermiones el operador toma la forma de un determinante y para los bosones de un permanente (determinante sin signo):

$$\hat{S}_+ \prod_{j=1}^N \psi_{\nu_j}(\mathbf{r}_j) = \sum_{p \in S_N} \left( \prod_{j=1}^N \psi_{\nu_j}(\mathbf{r}_{p(j)}) \right) \quad (\text{bosones})$$

$$\hat{S}_- \prod_{j=1}^N \psi_{\nu_j}(\mathbf{r}_j) = \sum_{p \in S_N} \left( \prod_{j=1}^N \psi_{\nu_j}(\mathbf{r}_{p(j)}) \right) \text{sign}(p) \quad (\text{fermiones})$$

**Determinante de Slater**

donde  $S_N$  es el grupo de las  $N!$  permutaciones en las coordenadas.

# Primera cuantización

## Operadores

En general los operadores de un cuerpo, típicamente la energía cinética o potencial externo, se pueden escribir como:

$$\mathcal{H}^0 = \sum_{j=1}^N \hat{h}_j = \sum_{j=1}^N \sum_{\nu_a, \nu_b} \underbrace{\langle \nu_b | \hat{h}_j | \nu_a \rangle}_{\text{matrix element}} |\nu_b\rangle \langle \nu_a|$$

con

$$\hat{h}_{\nu_b, \nu_a} = \int d\mathbf{r}_j \psi_{\nu_b}^*(\mathbf{r}_j) h(\mathbf{r}_j, \nabla_{\mathbf{r}_j}) \psi_{\nu_a}(\mathbf{r}_j)$$

# Primera cuantización

## Operadores

Si pasamos a operadores de dos cuerpos, como por ejemplo el potencial de Coulomb, que dependen de dos coordenadas  $j$  y  $k$ :

$$V = \sum_{j>k} V_{jk} = \frac{1}{2} \sum_{j \neq k} V_{jk} =$$

$$= \frac{1}{2} \sum_{j \neq k} \sum_{\substack{\nu_a, \nu_b \\ \nu_c, \nu_d}} \langle \nu_c \nu_d | V_{jk} | \nu_a \nu_b \rangle |\psi_{\nu_c}(\mathbf{r}_j)\rangle |\psi_{\nu_d}(\mathbf{r}_k)\rangle \langle \psi_{\nu_a}(\mathbf{r}_j) | \langle \psi_{\nu_b}(\mathbf{r}_k) |$$

con

$$V_{\nu_c \nu_d, \nu_a \nu_b} = \int d\mathbf{r}_j d\mathbf{r}_k \psi_{\nu_c}^*(\mathbf{r}_j) \psi_{\nu_d}^*(\mathbf{r}_k) V(\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_k) \psi_{\nu_a}(\mathbf{r}_j) \psi_{\nu_b}(\mathbf{r}_k)$$

# Segunda cuantización

## Introducción

La segunda cuantización está basado en la representación del número de ocupación.

Partiendo de primera cuantización y sus funciones producto de autofunciones de una partícula, la segunda cuantización estará basada en los números de ocupación de dichos estados.

Lo primero es definir una base **ordenada** de autofunciones de una partícula

$$\{ |\nu_1\rangle, |\nu_2\rangle, |\nu_3\rangle, \dots \}$$

# Segunda cuantización

## Representación de ocupación

Los estados de la base para el sistema de  $N$  partículas se obtienen simplemente listando las ocupaciones de cada estado. Se definen los operadores de ocupación

$$\hat{n}_{\nu_j} |n_{\nu_j}\rangle = n_{\nu_j} |n_{\nu_j}\rangle$$

y la base para el sistema de  $N$  partículas es entonces:

$$\{|n_{\nu_1}, n_{\nu_2}, n_{\nu_3}, \dots\rangle\}, \sum_j n_{\nu_j} = N.$$

El espacio generado por esta base, es el espacio de Fock

$$\mathcal{F} = \mathcal{F}_0 \oplus \mathcal{F}_1 \oplus \mathcal{F}_2 \oplus \mathcal{F}_3 \oplus \dots$$

# Segunda cuantización

## Bosones

Para conectar primera y segunda cuantización introduciremos el operador de creación:

$$\hat{b}_{\nu_j}^\dagger |\dots, n_{\nu_j}, \dots\rangle = B_+(n_{\nu_j}) |\dots, n_{\nu_j} + 1, \dots\rangle$$

El único elemento de matriz no nulo del operador es

$$\langle \dots, n_{\nu_j} + 1, \dots | \hat{b}_{\nu_j}^\dagger | \dots, n_{\nu_j}, \dots \rangle$$

y su adjunto

$$\begin{aligned} \langle \dots, n_{\nu_j} + 1, \dots | \hat{b}_{\nu_j}^\dagger | \dots, n_{\nu_j}, \dots \rangle^* &= \\ &= \langle \dots, n_{\nu_j}, \dots | (\hat{b}_{\nu_j}^\dagger)^\dagger | \dots, n_{\nu_j} + 1, \dots \rangle \end{aligned}$$

# Segunda cuantización

## Bosones

Por lo tanto, podemos definir al operador de destrucción como

$$\hat{b}_{\nu_j} |\dots, n_{\nu_j}, \dots\rangle = B_-(n_{\nu_j}) |\dots, n_{\nu_j} - 1, \dots\rangle$$

Los operadores de creación y destrucción son los operadores **fundamentales** en segunda cuantización y, como veremos, cualquier otro operador puede ser expresado en función de ellos.

# Segunda cuantización

## Bosones

Si actuamos sobre el “vacío” (cero partículas) es claro que estos operadores no conmutan, dado que:

$$\hat{b}_{\nu_j}^\dagger \hat{b}_{\nu_j} |0\rangle = 0 \text{ y } \hat{b}_{\nu_j} \hat{b}_{\nu_j}^\dagger |0\rangle = |0\rangle \quad (B_+(0) = 1, B_-(0) = 0)$$

$$\text{Como } \langle 1 | \hat{b}^\dagger | 0 \rangle^* = 1 \Rightarrow \langle 0 | \hat{b} | 1 \rangle = 1 \iff B_-(1) = 1.$$

Su álgebra de conmutación está dada por la física de los bosones:

$$\left[ \hat{b}_{\nu_j}^\dagger, \hat{b}_{\nu_k}^\dagger \right] = 0 \quad \left[ \hat{b}_{\nu_j}, \hat{b}_{\nu_k} \right] = 0 \quad \left[ \hat{b}_{\nu_j}, \hat{b}_{\nu_k}^\dagger \right] = \delta_{\nu_j, \nu_k}$$

# Segunda cuantización

## Bosones

Si actuamos sobre el “vacío” (cero partículas) es claro que estos operadores no conmutan, dado que:

$$\hat{b}_{\nu_j}^\dagger \hat{b}_{\nu_j} |0\rangle = 0 \text{ y } \hat{b}_{\nu_j} \hat{b}_{\nu_j}^\dagger |0\rangle = |0\rangle \quad (B_+(0) = 1, B_-(0) = 0)$$

Como  $\langle 1 | \hat{b}^\dagger | 0 \rangle^* = 1 \Rightarrow \langle 0 | \hat{b} | 1 \rangle = 1 \iff B_-(1) = 1$ .

Su álgebra de conmutación está dada por la física de los bosones:

$$\left[ \hat{b}_{\nu_j}^\dagger, \hat{b}_{\nu_k}^\dagger \right] = 0 \quad \left[ \hat{b}_{\nu_j}, \hat{b}_{\nu_k} \right] = 0 \quad \left[ \hat{b}_{\nu_j}, \hat{b}_{\nu_k}^\dagger \right] = \delta_{\nu_j, \nu_k}$$

Actuando sobre **estados distintos**, debo garantizar que la función de onda es simétrica en  $j \leftrightarrow k$ .

# Segunda cuantización

## Bosones

Si actuamos sobre el “vacío” (cero partículas) es claro que estos operadores no conmutan, dado que:

$$\hat{b}_{\nu_j}^\dagger \hat{b}_{\nu_j} |0\rangle = 0 \text{ y } \hat{b}_{\nu_j} \hat{b}_{\nu_j}^\dagger |0\rangle = |0\rangle \quad (B_+(0) = 1, B_-(0) = 0)$$

Como  $\langle 1 | \hat{b}^\dagger | 0 \rangle^* = 1 \Rightarrow \langle 0 | \hat{b} | 1 \rangle = 1 \iff B_-(1) = 1$ .

Su álgebra de conmutación está dada por la física de los bosones:

$$\left[ \hat{b}_{\nu_j}^\dagger, \hat{b}_{\nu_k}^\dagger \right] = 0 \quad \left[ \hat{b}_{\nu_j}, \hat{b}_{\nu_k} \right] = 0 \quad \left[ \hat{b}_{\nu_j}, \hat{b}_{\nu_k}^\dagger \right] = \delta_{\nu_j, \nu_k}$$

Actuando sobre **estados idénticos**, debo prestar atención a la combinación creación-destrucción.

# Segunda cuantización

## Bosones

Si bien los operadores de creación y destrucción no son hermíticos, su producto  $\hat{b}_{\nu_j}^\dagger \hat{b}_{\nu_j}$  lo es.

De las relaciones de conmutación se obtiene

$$\left[ \hat{b}_{\nu}^\dagger \hat{b}_{\nu}, \hat{b}_{\nu} \right] = -\hat{b}_{\nu} \quad \left[ \hat{b}_{\nu}^\dagger \hat{b}_{\nu}, \hat{b}_{\nu}^\dagger \right] = \hat{b}_{\nu}^\dagger$$

Por otro lado, para cualquier estado  $|\phi\rangle$  (salvo el vacío) la norma de  $\hat{b}_{\nu}|\phi\rangle$  es

$$\langle \phi | \hat{b}_{\nu}^\dagger \hat{b}_{\nu} | \phi \rangle > 0$$

Elijamos un autoestado de  $\hat{b}_{\nu}^\dagger \hat{b}_{\nu} |\phi_\lambda\rangle = \lambda |\phi_\lambda\rangle$ . Por la ecuación anterior, tenemos que

$$\lambda > 0$$

# Segunda cuantización

## Bosones

Usando los conmutadores recién vistos, tenemos que

$$\begin{aligned}(\hat{b}_\nu^\dagger \hat{b}_\nu) \hat{b}_\nu |\phi_\lambda\rangle &= (\hat{b}_\nu \hat{b}_\nu^\dagger - 1) \hat{b}_\nu |\phi_\lambda\rangle = \hat{b}_\nu (\hat{b}_\nu^\dagger \hat{b}_\nu - 1) |\phi_\lambda\rangle = \\ &= \hat{b}_\nu (\lambda - 1) |\phi_\lambda\rangle = (\lambda - 1) \hat{b}_\nu |\phi_\lambda\rangle\end{aligned}$$

Entonces  $\hat{b}_\nu |\phi_\lambda\rangle$  es autoestado de  $\hat{b}_\nu^\dagger \hat{b}_\nu$  con autovalor  $(\lambda - 1)$ . Siguiendo el proceso, podríamos obtener autovalores menores que 0, lo cual vimos es incorrecto.

Por lo tanto, concluimos que:

$$\lambda \equiv n = 0, 1, 2, 3, \dots$$

donde incluimos el vacío ( $n = 0$ ).

# Segunda cuantización

## Bosones

Análogamente, podemos mostrar que

$$(\hat{b}_\nu^\dagger \hat{b}_\nu) \hat{b}_\nu^\dagger |\phi_\lambda\rangle = (n + 1) \hat{b}_\nu^\dagger |\phi_\lambda\rangle.$$

Así los factores de normalización son

$$\|\hat{b}_\nu |n_\nu\rangle\|^2 = \langle n_\nu | \hat{b}_\nu^\dagger \hat{b}_\nu |n_\nu\rangle = n_\nu$$

$$\|\hat{b}_\nu^\dagger |n_\nu\rangle\|^2 = \langle n_\nu | \hat{b}_\nu \hat{b}_\nu^\dagger |n_\nu\rangle = (n_\nu + 1)$$

Finalmente, obtenemos:

$$\hat{b}_\nu^\dagger \hat{b}_\nu \equiv \hat{n}_\nu; \quad \hat{b}_\nu^\dagger \hat{b}_\nu |n_\nu\rangle = n_\nu |n_\nu\rangle; \quad n_\nu = 0, 1, 2, 3, \dots$$

$$\hat{b}_\nu |n_\nu\rangle = \sqrt{n_\nu} |n_\nu - 1\rangle; \quad \hat{b}_\nu^\dagger |n_\nu\rangle = \sqrt{n_\nu + 1} |n_\nu + 1\rangle$$

$$(\hat{b}_\nu^\dagger)^{n_\nu} |0\rangle = \sqrt{n_\nu!} |n_\nu\rangle$$

# Segunda cuantización

## Bosones

Ahora estamos en condiciones de identificar los estados de  $N$ -partículas en segunda cuantificación:

$$|\Psi\rangle = \hat{b}_{\nu_1}^\dagger \hat{b}_{\nu_2}^\dagger \cdots \hat{b}_{\nu_N}^\dagger |0\rangle$$

con el estado perfectamente simétrico en los índices de los estados de una partícula como corresponde para bosones.

# Segunda cuantización

## Fermiones

Lo mismo puede hacerse para fermiones, solo que ahora el álgebra es distinta, para garantizar la anti-simetría en el intercambio de partículas.

Los operadores de creación y destrucción para fermiones cumplen las siguientes reglas de anticonmutación:

$$\{\hat{c}_{\nu_j}^\dagger, \hat{c}_{\nu_k}^\dagger\} = 0 \quad \{\hat{c}_{\nu_j}, \hat{c}_{\nu_k}\} = 0 \quad \{\hat{c}_{\nu_j}^\dagger, \hat{c}_{\nu_k}\} = \delta_{\nu_j, \nu_k}$$

La primer consecuencia de estas reglas es

$$(\hat{c}_{\nu_j}^\dagger)^2 = 0 \quad (\hat{c}_{\nu_j})^2 = 0 \quad (\text{Prin de exclusión})$$

# Segunda cuantización

## Fermiones

Igual que antes, se puede probar que

$$[\hat{c}_\nu^\dagger \hat{c}_\nu, \hat{c}_\nu] = -\hat{c}_\nu \quad [\hat{c}_\nu^\dagger \hat{c}_\nu, \hat{c}_\nu^\dagger] = \hat{c}_\nu^\dagger$$

y por lo tanto  $\hat{c}_\nu^\dagger$  ( $\hat{c}_\nu$ ) aumenta (disminuye) el autovalor de  $\hat{c}_\nu^\dagger \hat{c}_\nu$  en uno.

Además  $(\hat{c}_\nu^\dagger \hat{c}_\nu)^2 = \hat{c}_\nu^\dagger (\hat{c}_\nu \hat{c}_\nu^\dagger) \hat{c}_\nu = \hat{c}_\nu^\dagger (1 - \hat{c}_\nu^\dagger \hat{c}_\nu) \hat{c}_\nu = \hat{c}_\nu^\dagger \hat{c}_\nu$ ,  
lo que implica

$$\hat{c}_\nu^\dagger \hat{c}_\nu (\hat{c}_\nu^\dagger \hat{c}_\nu - 1) = 0$$

O sea, los autovalores de  $\hat{c}_\nu^\dagger \hat{c}_\nu$  valen 0 y 1.

# Segunda cuantización

## Fermiones

En resumen,

$$\begin{aligned} \hat{c}_\nu^\dagger \hat{c}_\nu &= \hat{n}_\nu & \hat{c}_\nu^\dagger \hat{c}_\nu |n_\nu\rangle &= n_\nu |n_\nu\rangle & n_\nu &= 0, 1. \\ \hat{c}_\nu |0\rangle &= 0 & \hat{c}_\nu^\dagger |0\rangle &= |1\rangle & \hat{c}_\nu |1\rangle &= |0\rangle & \hat{c}_\nu^\dagger |1\rangle &= 0 \end{aligned}$$

Los estados de  $N$ -partículas, antisimétricos ante el intercambio de dos partículas son

$$|\Psi\rangle = \hat{c}_{\nu_1}^\dagger \hat{c}_{\nu_2}^\dagger \cdots \hat{c}_{\nu_N}^\dagger |0\rangle.$$

# Segunda cuantización

## Operadores en segunda cuantización

En segunda cuantización, los operadores de un cuerpo se expresan como (usamos  $\hat{a}$  para expresar resultados generales, tanto para fermiones como para bosones):

$$\mathcal{H}^0 = \sum_{\nu_a, \nu_b} \langle \nu_a | \hat{h} | \nu_b \rangle \hat{a}_{\nu_a}^\dagger \hat{a}_{\nu_b}$$

con

$$\langle \nu_a | \hat{h} | \nu_b \rangle = \int d\mathbf{r} \psi_{\nu_a}^*(\mathbf{r}) h(\mathbf{r}) \psi_{\nu_b}(\mathbf{r}).$$

Pueden probar que la acción del operador sobre un estado genérico de  $N$ -partículas es idéntico en ambas representaciones.

# Segunda cuantización

## Operadores en segunda cuantización

Para un operador de dos cuerpos, el resultado es análogo

$$V = \frac{1}{2} \sum_{\substack{\nu_a, \nu_b \\ \nu_c, \nu_d}} V_{\nu_c \nu_d, \nu_a \nu_b} \hat{a}_{\nu_c}^\dagger \hat{a}_{\nu_d}^\dagger \hat{a}_{\nu_b} \hat{a}_{\nu_a}$$

donde

$$V_{\nu_c \nu_d, \nu_a \nu_b} = \int d\mathbf{r}' \phi_{\nu_c}^*(\mathbf{r}) \phi_{\nu_d}^*(\mathbf{r}') v(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \phi_{\nu_a}(\mathbf{r}) \phi_{\nu_b}(\mathbf{r}')$$

Nuevamente, pueden probar que la acción del operador sobre un estado genérico de  $N$ -partículas es idéntico en ambas representaciones.

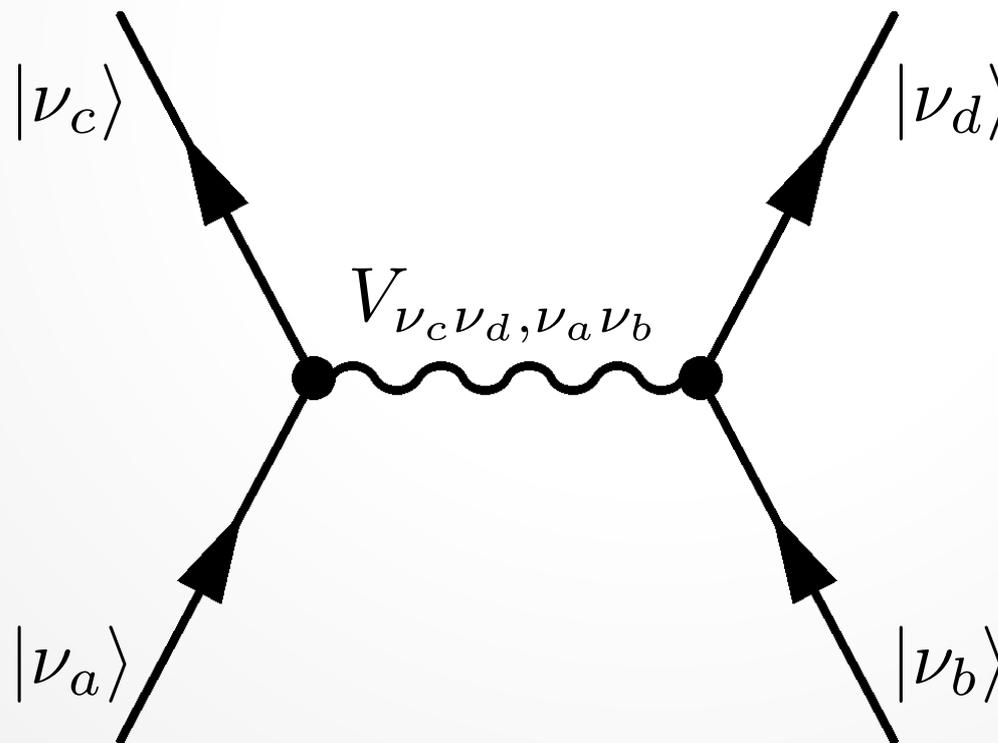
# Segunda cuantización

## Operadores en segunda cuantización

Para un operador de dos cuerpos, el resultado es análogo

$$V = \frac{1}{2} \sum_{\substack{\nu_a, \nu_b \\ \nu_c, \nu_d}} V_{\nu_c \nu_d, \nu_a \nu_b} \hat{a}_{\nu_c}^\dagger \hat{a}_{\nu_d}^\dagger \hat{a}_{\nu_b} \hat{a}_{\nu_a}$$

¡el orden es importante!



Transición de

$$|0\rangle = \hat{a}_{\nu_b} \hat{a}_{\nu_a} |\nu_a \nu_b\rangle$$

a

$$|\nu_c \nu_d\rangle = \hat{a}_{\nu_c}^\dagger \hat{a}_{\nu_d}^\dagger |0\rangle$$

# Segunda cuantización

## Cambio de base

En mecánica cuántica, los operadores pueden ser expresados en distintas representaciones.

Si tenemos dos bases completas y ordenadas de estados de una partícula:

$$\{|\psi_{\nu_1}\rangle, \dots, |\psi_{\nu_N}\rangle\} \quad \{|\tilde{\psi}_{\mu_1}\rangle, \dots, |\tilde{\psi}_{\mu_N}\rangle\}$$

Por completitud

$$|\tilde{\psi}_{\mu}\rangle = \sum_{\nu} |\psi_{\nu}\rangle \langle \psi_{\nu} | \tilde{\psi}_{\mu} \rangle = \sum_{\nu} \langle \tilde{\psi}_{\mu} | \psi_{\nu} \rangle^* |\psi_{\nu}\rangle$$

# Segunda cuantización

## Cambio de base

En mecánica cuántica, los operadores pueden ser expresados en distintas representaciones.

Si tenemos dos bases completas y ordenadas de estados de una partícula:

$$\{|\psi_{\nu_1}\rangle, \dots, |\psi_{\nu_N}\rangle\} \quad \{|\tilde{\psi}_{\mu_1}\rangle, \dots, |\tilde{\psi}_{\mu_N}\rangle\}$$

La generalización a operadores de creación/destrucción es inmediata:

$$\tilde{a}_{\mu} = \sum_{\nu} \langle \tilde{\psi}_{\mu} | \psi_{\nu} \rangle a_{\nu}$$

$$\tilde{a}_{\mu}^{\dagger} = \sum_{\nu} \langle \tilde{\psi}_{\mu} | \psi_{\nu} \rangle^{*} a_{\nu}^{\dagger}$$

# Segunda cuantización

## Representación en posición: operadores de campo

Un base particular requiere atención especial, la base o representación espacial. En este caso los operadores de creación/destrucción se denominan “operadores de campo”.

Elijamos

$$\{|\tilde{\psi}_\mu\rangle\} \rightarrow \{|\mathbf{r}\rangle\}$$

y usemos los cambios de base

$$\hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}) = \sum_\nu \langle \mathbf{r} | \psi_\nu \rangle^* \hat{a}_\nu^\dagger = \sum_\nu \psi_\nu^*(\mathbf{r}) \hat{a}_\nu^\dagger$$

$$\hat{\Psi}(\mathbf{r}) = \sum_\nu \langle \mathbf{r} | \psi_\nu \rangle \hat{a}_\nu = \sum_\nu \psi_\nu(\mathbf{r}) \hat{a}_\nu$$

# Segunda cuantización

## Representación en posición: operadores de campo

Un base particular requiere atención especial, la base o representación espacial. En este caso los operadores de creación/destrucción se denominan “operadores de campo”. Obviamente los cambios de base preservan las relaciones de conmutación, por lo que:

$$\left[ \hat{\Psi}(\mathbf{r}_1), \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}_2) \right] = \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2), \text{ (bosones)}$$

$$\left\{ \hat{\Psi}(\mathbf{r}_1), \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}_2) \right\} = \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2), \text{ (fermiones)}$$

# Segunda cuantización

## Representación en posición: operadores de campo

En sistemas homogéneos, muchas veces es preferible transformar Fourier los operadores y pasar a la representación de momentos. Eligiendo

$$\{|\psi_\nu\rangle\} \rightarrow \{|\mathbf{k}\rangle\}$$

$$\hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{k}} \langle \mathbf{r} | \mathbf{k} \rangle^* \hat{a}_{\mathbf{k}}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\mathbf{k}} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \hat{a}_{\mathbf{k}}^\dagger$$

$$\hat{\Psi}(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{k}} \langle \mathbf{r} | \mathbf{k} \rangle \hat{a}_{\mathbf{k}} = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \hat{a}_{\mathbf{k}}$$

# Segunda cuantización

## Representación en posición: operadores de campo

En sistemas homogéneos, muchas veces es preferible transformar Fourier los operadores y pasar a la representación de momentos. Eligiendo

$$\{|\psi_\nu\rangle\} \rightarrow \{|\mathbf{k}\rangle\}$$

Invirtiendo

$$\hat{a}_{\mathbf{k}}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{V}} \int d\mathbf{r} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r})$$

$$\hat{a}_{\mathbf{k}} = \frac{1}{\sqrt{V}} \int d\mathbf{r} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \hat{\Psi}(\mathbf{r})$$

# Ejemplos

## La función de onda de $N$ -partículas

Agregamos dos fermiones a una “caja” con momentos bien definidos:

$$|\Phi\rangle = |\mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2\rangle = c_{\mathbf{k}_1}^\dagger c_{\mathbf{k}_2}^\dagger |0\rangle$$

¿Cómo obtenemos la función de onda de dos partículas?

# Ejemplos

## La función de onda de $N$ -partículas

Agregamos dos fermiones a una “caja” con momentos bien definidos:

$$|\Phi\rangle = |\mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2\rangle = \hat{c}_{\mathbf{k}_1}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k}_2}^\dagger |0\rangle$$

¿Cómo obtenemos la función de onda de dos partículas?  
Explícitamente

$$\begin{aligned} \Phi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) &= \langle \mathbf{r}_1 \mathbf{r}_2 | \Phi \rangle = \langle \mathbf{r}_1 \mathbf{r}_2 | \hat{c}_{\mathbf{k}_1}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k}_2}^\dagger |0\rangle \\ &= \langle 0 | \hat{\Psi}(\mathbf{r}_2) \hat{\Psi}(\mathbf{r}_1) c_{\mathbf{k}_1}^\dagger c_{\mathbf{k}_2}^\dagger |0\rangle \end{aligned}$$

El plan es mover los operadores de destrucción a la derecha para aniquilar el vacío.

# Ejemplos

## La función de onda de $N$ -partículas

Agregamos dos fermiones a una “caja” con momentos bien definidos:

$$|\Phi\rangle = |\mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2\rangle = \hat{c}_{\mathbf{k}_1}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k}_2}^\dagger |0\rangle$$

¿Cómo obtenemos la función de onda de dos partículas?

Para ello necesitamos el anticonmutador

$$\{\hat{\Psi}(\mathbf{r}), c_{\mathbf{k}}^\dagger\} = \int d\mathbf{r}' \underbrace{\{\hat{\Psi}(\mathbf{r}), \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}')\}}_{\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')} \langle \mathbf{r}' | \mathbf{k} \rangle = \langle \mathbf{r} | \mathbf{k} \rangle = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}}$$

# Ejemplos

## La función de onda de $N$ -partículas

Agregamos dos fermiones a una “caja” con momentos bien definidos:

$$|\Phi\rangle = |\mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2\rangle = \hat{c}_{\mathbf{k}_1}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k}_2}^\dagger |0\rangle$$

¿Cómo obtenemos la función de onda de dos partículas?

Procediendo

$$\begin{aligned} \langle 0 | \hat{\Psi}(\mathbf{r}_2) \hat{\Psi}(\mathbf{r}_1) c_{\mathbf{k}_1}^\dagger c_{\mathbf{k}_2}^\dagger | 0 \rangle &= \langle \mathbf{r}_1 | \mathbf{k}_1 \rangle \langle \mathbf{r}_2 | \mathbf{k}_2 \rangle - \langle \mathbf{r}_2 | \mathbf{k}_1 \rangle \langle \mathbf{r}_1 | \mathbf{k}_2 \rangle \\ &= \begin{vmatrix} \langle \mathbf{r}_1 | \mathbf{k}_1 \rangle & \langle \mathbf{r}_1 | \mathbf{k}_2 \rangle \\ \langle \mathbf{r}_2 | \mathbf{k}_1 \rangle & \langle \mathbf{r}_2 | \mathbf{k}_2 \rangle \end{vmatrix} \end{aligned}$$

obtenemos naturalmente el determinante de Slater.

# Ejemplos

## Energía cinética

En primera cuantización, la energía cinética tiene las siguientes representaciones

$$\hat{T}_{\mathbf{r},\sigma\sigma'} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_{\mathbf{r}}^2 \delta_{\sigma\sigma'} \quad \hat{T}_{\mathbf{k},\sigma\sigma'} = -\frac{\hbar^2 k^2}{2m} \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \delta_{\sigma\sigma'}$$

Por lo tanto, en segunda cuantización se escribe

$$\hat{T} = \sum_{\mathbf{k}\sigma} \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \hat{a}_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{k}\sigma} = -\frac{\hbar^2}{2m} \sum_{\sigma} \int d\mathbf{r} \hat{\Psi}_{\sigma}^\dagger(\mathbf{r}) \left( \nabla_{\mathbf{r}}^2 \hat{\Psi}_{\sigma}(\mathbf{r}) \right)$$

# Ejemplos

## Operador densidad

En primera cuantización, el operador densidad se puede resolver de

$$\rho_{\sigma}(\mathbf{r}) = |\psi_{\sigma}(\mathbf{r})|^2 = \int d\mathbf{r}' \psi_{\sigma}^*(\mathbf{r}') \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \psi_{\sigma}(\mathbf{r})$$

entonces  $\hat{\rho}_{\mathbf{r}\sigma} = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$ .

Por lo tanto, en segunda cuantización se escribe

$$\hat{\rho}_{\mathbf{r}\sigma} = \int d\mathbf{r}' \hat{\Psi}_{\sigma}^{\dagger}(\mathbf{r}') \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \hat{\Psi}_{\sigma}(\mathbf{r}) = \hat{\Psi}_{\sigma}^{\dagger}(\mathbf{r}) \hat{\Psi}_{\sigma}(\mathbf{r}).$$

# Ejemplos

## Operador densidad

En primera cuantización, el operador densidad se puede resolver de

$$\rho_{\sigma}(\mathbf{r}) = |\psi_{\sigma}(\mathbf{r})|^2 = \int d\mathbf{r}' \psi_{\sigma}^*(\mathbf{r}') \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \psi_{\sigma}(\mathbf{r})$$

entonces  $\hat{\rho}_{\mathbf{r}\sigma} = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$ .

Por lo tanto, en el espacio de momentos, se escribe

$$\hat{\rho}_{\mathbf{r}\sigma} = \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\cdot\mathbf{r}} \hat{a}_{\mathbf{k}'\sigma}^{\dagger} \hat{a}_{\mathbf{k}\sigma} = \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{q}} e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} \hat{a}_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\sigma}^{\dagger} \hat{a}_{\mathbf{k}\sigma}$$

# Ejemplos

## Operador de Coulomb

El operador de Coulomb en la representación de posición se puede construir directamente

$$\hat{V}(\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1) =$$
$$= \frac{1}{2} \sum_{\sigma_1 \sigma_2} \int d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 \frac{e_0^2}{|\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1|} \hat{\Psi}_{\sigma_1}^\dagger(\mathbf{r}_1) \hat{\Psi}_{\sigma_2}^\dagger(\mathbf{r}_2) \hat{\Psi}_{\sigma_2}(\mathbf{r}_2) \hat{\Psi}_{\sigma_1}(\mathbf{r}_1),$$

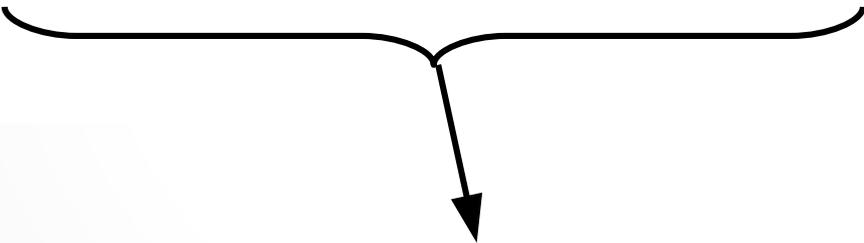
donde  $e_0^2 = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}$ .

# Ejemplos

## Operador de Coulomb

El operador de Coulomb en la representación de momentos se puede construir a partir de la definición

$$\hat{V} =$$

$$= \frac{1}{2} \sum_{\sigma_1 \sigma_2} \sum_{\substack{\mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2 \\ \mathbf{k}_3 \mathbf{k}_4}} \langle \mathbf{k}_3 \sigma_1, \mathbf{k}_4 \sigma_2 | V | \mathbf{k}_1 \sigma_1, \mathbf{k}_2 \sigma_2 \rangle \hat{a}_{\mathbf{k}_3 \sigma_1}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{k}_4 \sigma_2}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{k}_2 \sigma_2} \hat{a}_{\mathbf{k}_1 \sigma_1}$$


$$\frac{e_0^2}{V^2} \int d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 \frac{\exp[i(\mathbf{k}_1 \cdot \mathbf{r}_1 + \mathbf{k}_2 \cdot \mathbf{r}_2 - \mathbf{k}_3 \cdot \mathbf{r}_1 - \mathbf{k}_4 \cdot \mathbf{r}_2)]}{|\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1|}$$

# Ejemplos

## Operador de Coulomb

El operador de Coulomb en la representación de momentos se puede construir a partir de la definición.

La exponencial se puede reacomodar

$$\begin{aligned} \exp[i(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_3) \cdot \mathbf{r}_1 + i(\mathbf{k}_2 - \mathbf{k}_4) \cdot \mathbf{r}_2] &= \\ &= \exp[i(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_3 + \mathbf{k}_2 - \mathbf{k}_4) \cdot \mathbf{r}_1] \exp[i(\mathbf{k}_2 - \mathbf{k}_4) \cdot (\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1)]. \end{aligned}$$

Lo que permite partir la integral en dos haciendo los cambios

$$\mathbf{q} \equiv \mathbf{k}_2 - \mathbf{k}_4$$

$$\mathbf{r} \equiv \mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1$$

# Ejemplos

## Operador de Coulomb

El operador de Coulomb en la representación de momentos se puede construir a partir de la definición.

Las integrales son

$$\int d\mathbf{r}_1 e^{i(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_3 + \mathbf{q}) \cdot \mathbf{r}_1} = V \delta_{\mathbf{k}_3, \mathbf{k}_1 + \mathbf{q}}$$

Conservación del  
momento

$$V_{\mathbf{q}} = \int d\mathbf{r} \frac{e_0^2}{r} e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}} = \frac{4\pi e_0^2}{q^2}$$

Transformada del potencial

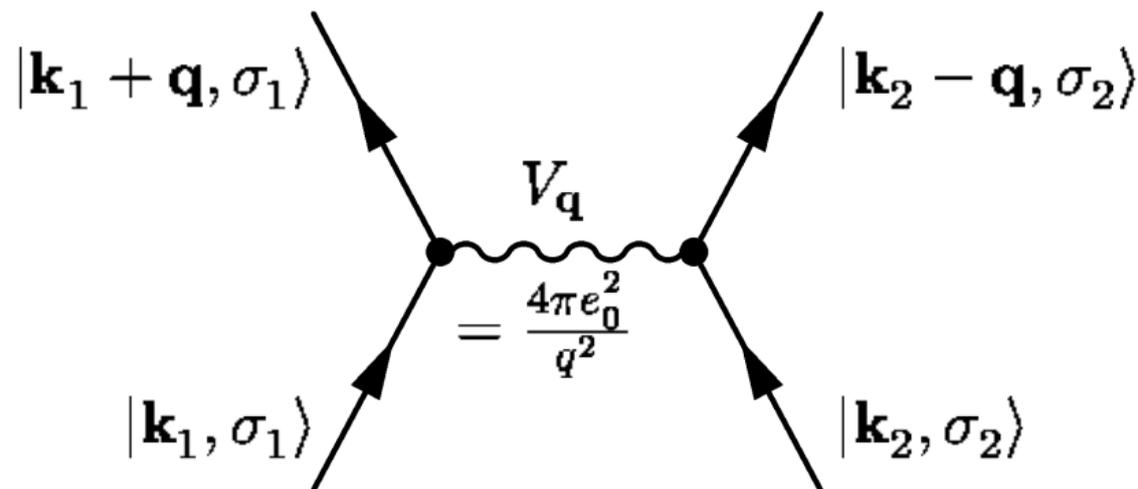
# Ejemplos

## Operador de Coulomb

El operador de Coulomb en la representación de momentos se puede construir a partir de la definición.

El resultado final es

$$V = \frac{1}{2V} \sum_{\sigma_1 \sigma_2} \sum_{\mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2 \mathbf{q}} V_{\mathbf{q}} \hat{a}_{\mathbf{k}_1 + \mathbf{q}, \sigma_1}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{k}_2 - \mathbf{q}, \sigma_2}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{k}_2 \sigma_2} \hat{a}_{\mathbf{k}_1 \sigma_1}$$



Fin de la clase

**¡Muchas gracias!**