

# Transformaciones de Bogolubov



José M. Lia

Departamento de Física, FCEyN, UBA

Física de Muchos Cuerpos  
2º Cuatrimestre de 2020

# Partículas Individuales

1. Originalmente teníamos el espacio de estados de una partícula.
2. En 2da cuantización, pasamos a estados de muchas partículas, donde nos concentramos en la ocupación de cada uno de esos estados de partícula individual. Definimos los operadores de creación y destrucción para cada uno de estos estados:  $c^+$  y  $c$ .
3. Definimos el espacio de Fock, que nos permitía “saltar” de un número de partículas a otro, preservando la (anti-)simetría de la función de onda total.
4. Vimos que los operadores que conocíamos, de  $N$  partículas, podían expresarse como productos de los  $c^+$  y  $c$ , apropiadamente “pesados” por sus elementos de matriz.
5. De alguna forma, en todo momento pensamos en *partículas individuales*: las vemos *de a una a la vez...*

Todo bien, pero, si tenemos estados de dos partículas ligadas (p.ej., por alguna interacción), ¿podremos describir el “grupo” como unidad?

Todo bien, pero, si tenemos estados de dos partículas ligadas (p.ej., por alguna interacción), ¿podremos describir el “grupo” como unidad?

**Sí, y podemos construir esta nueva descripción usando las herramientas que tenemos de segunda cuantización.**

# Pares de partículas — Mismo espín

Consideremos un estado ligado de dos partículas (una “molécula”) en el mismo estado de espín (bosones o fermiones), caracterizado por una función del tipo:

$$\chi(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)$$

Podemos separar el impulso relativo entre las partículas, del total de su centro de masa. La función de onda total, entonces, es de la forma:

$$\begin{aligned}\phi_{\mathbf{K}}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) &= (L)^{-3/2} e^{i\mathbf{K}\cdot(\mathbf{r}_1+\mathbf{r}_2)/2} \chi(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) \\ &= (L)^{-3} \sum_{\mathbf{k}} g_{\mathbf{k}} e^{i(\frac{\mathbf{K}}{2}+\mathbf{k})\cdot\mathbf{r}_1} e^{i(\frac{\mathbf{K}}{2}-\mathbf{k})\cdot\mathbf{r}_2}\end{aligned}$$

Donde los  $g_{\mathbf{k}}$  son los coeficientes de la transformada de Fourier sobre el volumen ocupado por las partículas  $V = L^3$ . Los  $g_{\mathbf{k}}$  deben respetar la simetría de  $\phi_{\mathbf{K}}$ .

$$\begin{aligned}g_{\mathbf{k}} &= \frac{1}{L^{3/2}} \int_{L^3} d^3r e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \chi(\mathbf{r}) \\ \chi(\mathbf{r}) &= \frac{1}{L^{3/2}} \sum_{\mathbf{k}} g_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}\end{aligned}$$

# Pares de partículas — Mismo espín

Podemos expresar la función de onda de forma más conveniente como *ket*

$$\begin{aligned}\phi_{\mathbf{K}}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) &= (L)^{-3/2} e^{i\mathbf{K}\cdot(\mathbf{r}_1+\mathbf{r}_2)/2} \chi(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) \\ &= (L)^{-3} \sum_{\mathbf{k}} g_{\mathbf{k}} e^{i(\frac{\mathbf{K}}{2}+\mathbf{k})\cdot\mathbf{r}_1} e^{i(\frac{\mathbf{K}}{2}-\mathbf{k})\cdot\mathbf{r}_2}\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}|\phi_{\mathbf{K}}(1, 2)\rangle &= \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} g_{\mathbf{k}} \left[ \left| 1 : \left( \frac{\mathbf{K}}{2} + \mathbf{k} \right) ; 2 : \left( \frac{\mathbf{K}}{2} - \mathbf{k} \right) \right\rangle \right. \\ &\quad \left. + \eta \left| 1 : \left( \frac{\mathbf{K}}{2} - \mathbf{k} \right) ; 2 : \left( \frac{\mathbf{K}}{2} + \mathbf{k} \right) \right\rangle \right]\end{aligned}$$

Donde  $\eta$  tiene en cuenta la (anti)simetría de la función de onda, y el factor  $\frac{1}{2}$  corrige el conteo en  $\mathbf{k}$ .

De esta definición podemos deducir que los  $g_{\mathbf{k}}$  cumplen  $g_{\mathbf{k}} = \eta g_{-\mathbf{k}}$ .

# Pares de partículas – Mismo espín

Pasemos ahora a segunda cuantización y expresemos este *ket* en términos de operadores de creación y destrucción

$$|\phi_{\mathbf{K}(1,2)}\rangle = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} g_{\mathbf{k}} \left[ \left| 1: \left( \frac{\mathbf{K}}{2} + \mathbf{k} \right); 2: \left( \frac{\mathbf{K}}{2} - \mathbf{k} \right) \right\rangle + \eta \left| 1: \left( \frac{\mathbf{K}}{2} - \mathbf{k} \right); 2: \left( \frac{\mathbf{K}}{2} + \mathbf{k} \right) \right\rangle \right]$$

$$|\phi_{\mathbf{K}}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \sum_{\mathbf{k}} g_{\mathbf{k}} a_{\frac{\mathbf{K}}{2} + \mathbf{k}}^{\dagger} a_{\frac{\mathbf{K}}{2} - \mathbf{k}}^{\dagger} |0\rangle$$

Tenemos entonces una definición de un nuevo operador  $A_{\mathbf{K}}^{\dagger}$  que “crea” un par en un estado de impulso total  $\mathbf{K}$ .

$$A_{\mathbf{K}}^{\dagger} = \frac{1}{\sqrt{2}} \sum_{\mathbf{k}} g_{\mathbf{k}} a_{\frac{\mathbf{K}}{2} + \mathbf{k}}^{\dagger} a_{\frac{\mathbf{K}}{2} - \mathbf{k}}^{\dagger}$$

A partir de aquí podemos dejar de lado la idea de “molécula” y la existencia de un potencial, y pensar que los  $g_{\mathbf{k}}$  son parámetros arbitrarios (a menos de una normalización) que definen cómo se crea el par en cuestión.

# Pares de partículas – Distinto espín

Podemos hacer algo parecido a lo anterior si el estado de dos partículas tiene espín  $|\chi_S\rangle$

$$|\phi_{\mathbf{K}}(1,2)\rangle = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} g_{\mathbf{k}} \sum_{\nu_1, \nu_2} \langle \nu_1, \nu_2 | \chi_S \rangle \left\{ \left| 1: \frac{\mathbf{K}}{2} + \mathbf{k}, \nu_1; 2: \frac{\mathbf{K}}{2} - \mathbf{k}, \nu_2 \right\rangle + \eta \left| 1: \frac{\mathbf{K}}{2} - \mathbf{k}, \nu_2; 2: \frac{\mathbf{K}}{2} + \mathbf{k}, \nu_1 \right\rangle \right\}$$

Ahora el operador  $A_{\mathbf{K}}^{\dagger}$  tiene en cuenta el espín:

$$A_{\mathbf{K}}^{\dagger} = \frac{1}{\sqrt{2}} \sum_{\mathbf{k}} g_{\mathbf{k}} \sum_{\nu_1, \nu_2} \langle \nu_1, \nu_2 | \chi_S \rangle a_{\frac{\mathbf{K}}{2} + \mathbf{k}, \nu_1}^{\dagger} a_{\frac{\mathbf{K}}{2} - \mathbf{k}, \nu_2}^{\dagger}$$

Un ejemplo importante es el de un grupo de fermiones en un singlete (i.e., autoestado de  $S = 0$ ).

$$A_{\mathbf{K}}^{\dagger} = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} g_{\mathbf{k}} \left[ a_{\frac{\mathbf{K}}{2} + \mathbf{k}, \nu=+}^{\dagger} a_{\frac{\mathbf{K}}{2} - \mathbf{k}, \nu=-}^{\dagger} - a_{\frac{\mathbf{K}}{2} + \mathbf{k}, \nu=-}^{\dagger} a_{\frac{\mathbf{K}}{2} - \mathbf{k}, \nu=+}^{\dagger} \right]$$



# Pares de estados – De $N$ a $\langle N \rangle$

Podemos construir otro estado, más “manejable”, formado por un número variable de pares, pero cuyo valor medio  $\langle N \rangle$  podamos definir a gusto. Este estado es más cómodo que el anterior, en el que  $P$  estaba fijo, para calcular, entre otras cosas, su normalización. Definimos, entonces:

$$|\Psi_{\text{paired}}\rangle = \sum_{P=0}^{\infty} \frac{1}{P!} |\Psi_P\rangle = \sum_{P=0}^{\infty} \frac{1}{P!} [A_{\mathbf{K}=0}^\dagger]^P |0\rangle \longrightarrow |\Psi_{\text{paired}}\rangle = \exp \left\{ A_{\mathbf{K}=0}^\dagger \right\} |0\rangle$$

Por ejemplo, para partículas en el mismo espín (y  $\mathbf{K} = 0$ ) este estado se puede factorizar en estados más fáciles de calcular (basta ver las relaciones de conmutación de los  $a_{\mathbf{k}}^\dagger$  y  $a_{\mathbf{k}}$ ).

$$|\Psi_{\text{paired}}\rangle = \exp \left\{ \sum_{\mathbf{k} \in D} \sqrt{2} g_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}}^\dagger a_{-\mathbf{k}}^\dagger \right\} |0\rangle \longrightarrow |\Psi_{\text{paired}}\rangle = \left\{ \prod_{\otimes \mathbf{k} \in D} \exp \left[ \sqrt{2} g_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}}^\dagger a_{-\mathbf{k}}^\dagger \right] \right\} |0\rangle$$

Con:  $|\varphi_{\mathbf{k}}\rangle = \exp \left\{ \sqrt{2} g_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}}^\dagger a_{-\mathbf{k}}^\dagger \right\} |0\rangle$

( $D$  previene el doble conteo).

$$g_{-\mathbf{k}} a_{\frac{\mathbf{K}}{2}-\mathbf{k}}^\dagger a_{\frac{\mathbf{K}}{2}+\mathbf{k}}^\dagger = \eta g_{\mathbf{k}} a_{\frac{\mathbf{K}}{2}-\mathbf{k}}^\dagger a_{\frac{\mathbf{K}}{2}+\mathbf{k}}^\dagger = g_{\mathbf{k}} a_{\frac{\mathbf{K}}{2}+\mathbf{k}}^\dagger a_{\frac{\mathbf{K}}{2}-\mathbf{k}}^\dagger$$

# Pares de estados – De $N$ a $\langle N \rangle$

Algo similar puede hacerse para fermiones en distinto estado de espín (e.g., singlete). Supondremos de ahora en más que  $\mathbf{K} = 0$  y trabajaremos con estas partículas o, como antes, con bosones de igual espín. Veamos que cada  $|\Psi_{\text{paired}}\rangle$  tiene su “propio” valor medio  $\langle N \rangle$ .

$$|\Psi_{\text{paired}}\rangle = \exp \left\{ \sum_{\mathbf{k}} g_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k},\uparrow}^{\dagger} a_{-\mathbf{k},\downarrow}^{\dagger} \right\} |0\rangle = \prod_{\mathbf{k}} |\varphi_{\mathbf{k}}\rangle \quad \begin{array}{l} |\varphi_{\mathbf{k}}\rangle = \exp \left[ g_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k},\uparrow}^{\dagger} a_{-\mathbf{k},\downarrow}^{\dagger} \right] |0\rangle \longrightarrow |\varphi_{\mathbf{k}}\rangle = \left[ 1 + g_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k},\uparrow}^{\dagger} a_{-\mathbf{k},\downarrow}^{\dagger} \right] |0\rangle \\ |\bar{\varphi}_{\mathbf{k}}\rangle = \left[ u_{\mathbf{k}} + v_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k},\uparrow}^{\dagger} a_{-\mathbf{k},\downarrow}^{\dagger} \right] |0\rangle \longleftarrow \end{array}$$

Donde  $u_{\mathbf{k}}$  y  $v_{\mathbf{k}}$  son nuevas constantes, que deben cumplir la condición de normalización:  $|u_{\mathbf{k}}|^2 + |v_{\mathbf{k}}|^2 = 1$

Podemos parametrizarlas entonces:  $u_{\mathbf{k}} = \cos \theta_{\mathbf{k}} e^{-i\zeta_{\mathbf{k}}} \quad v_{\mathbf{k}} = \sin \theta_{\mathbf{k}} e^{i\zeta_{\mathbf{k}}}$

Y podemos calcular el número de partículas en un dado par  $(\mathbf{k}_{\uparrow}, -\mathbf{k}_{\downarrow})$ , tomando el valor de expectación de:

$$\hat{n}_{(\text{pair } \mathbf{k})} = \hat{n}_{\mathbf{k},\uparrow} + \hat{n}_{-\mathbf{k},\downarrow} = a_{\mathbf{k},\uparrow}^{\dagger} a_{\mathbf{k},\uparrow} + a_{-\mathbf{k},\downarrow}^{\dagger} a_{-\mathbf{k},\downarrow}$$

Obtenemos:

$$\langle \hat{N} \rangle = 2 \sum_{\mathbf{k}} |v_{\mathbf{k}}|^2 = 2 \sum_{\mathbf{k}} \sin^2 \theta_{\mathbf{k}} \longrightarrow [\Delta N]^2 \leq 4 \sum_{\mathbf{k}} |v_{\mathbf{k}}|^2 = 2 \langle \hat{N} \rangle \longrightarrow \frac{\Delta N}{\langle \hat{N} \rangle} \leq \sqrt{\frac{2}{\langle \hat{N} \rangle}}$$

¡Gran canónico!

# Cuasipartículas — Transformaciones de Bogolubov

Volvamos a las partículas individuales sin interacción. El Hamiltoniano en ese caso es de la forma:  $\hat{H}_0 = \sum_i (\hbar\omega_i) a_i^\dagger a_i$  Con  $\hbar\omega_i$  las energías y  $|\Phi_0\rangle$  el estado de *ground*:  $a_i |\Phi_0\rangle = 0$

Podemos definir un operador  $b^*$ , a partir de los operadores de creación y destrucción para bosones (igual espín) y fermiones (distinto espín), que operen en el espacio  $(\mathbf{k}, -\mathbf{k})$ .

$$\begin{aligned}
 b_{\mathbf{k}} &= u_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}} + \eta v_{\mathbf{k}} a_{-\mathbf{k}}^\dagger & b_{\mathbf{k}}^\dagger &= u_{\mathbf{k}}^* a_{\mathbf{k}}^\dagger + \eta v_{\mathbf{k}}^* a_{-\mathbf{k}} & |\Psi_{\text{paired}}\rangle &= \left\{ \prod_{\otimes \mathbf{k} \in D} \exp \left[ \sqrt{2} g_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}}^\dagger a_{-\mathbf{k}}^\dagger \right] \right\} |0\rangle \\
 b_{-\mathbf{k}} &= u_{\mathbf{k}} a_{-\mathbf{k}} + v_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}}^\dagger & b_{-\mathbf{k}}^\dagger &= u_{\mathbf{k}}^* a_{-\mathbf{k}}^\dagger + v_{\mathbf{k}}^* a_{\mathbf{k}} & &= \prod_{\otimes \mathbf{k} \in D} |\varphi_{\mathbf{k}}\rangle
 \end{aligned}
 \quad (\mathbf{k} \neq 0)$$

Si imponemos la condición  $|u_{\mathbf{k}}|^2 - \eta |v_{\mathbf{k}}|^2 = 1$

Vemos que estos operadores satisfacen (Transf. unitaria).

$$\begin{aligned}
 [b_{\mathbf{k}}, b_{\mathbf{k}}^\dagger]_{-\eta} &= 1 \\
 [b_{-\mathbf{k}}, b_{-\mathbf{k}}^\dagger]_{-\eta} &= 1
 \end{aligned}$$

Estas son las relaciones de conmutación de los operadores de creación y destrucción en bosones y fermiones.

# Vacío de Cuasipartículas – Transf. de Bogolubov

Veamos la operación de los  $b$  y  $b^+$  sobre los estados de par, factores de  $|\Psi_{\text{paired}}\rangle$ :  $|\bar{\varphi}_{\mathbf{k}}\rangle = [u_{\mathbf{k}} + v_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k},\uparrow}^\dagger a_{-\mathbf{k},\downarrow}^\dagger] |0\rangle$

Sabiendo que  $a_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}}^\dagger a_{-\mathbf{k}}^\dagger |0\rangle = a_{-\mathbf{k}}^\dagger |0\rangle \rightarrow b_{\mathbf{k}} |\bar{\varphi}_{\mathbf{k}}\rangle = [u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}} a_{-\mathbf{k}}^\dagger - v_{\mathbf{k}} u_{\mathbf{k}} a_{-\mathbf{k}}^\dagger] |0\rangle = 0$

Por lo que los estados de par normalizados (fermiónicos) en singlete son autoestados del operador destrucción  $b_{\mathbf{k}}$  con autovalor 0. Lo mismo sucede para el caso de bosones,  $b_{\mathbf{k}}$  y el estado  $|\Psi_{\text{paired}}\rangle$ . Este estado es en cierto modo “un vacío”  $|0\rangle$ .

Si operamos con  $b_{\mathbf{k}}^+$ , el mismo estado, vemos que este operador “rompe” el par y crea una partícula con impulso  $\mathbf{k}$ . Por las reglas de conmutación, este operador sólo puede operar una vez. Tenemos entonces tres “excitaciones”:  $b_{\mathbf{k}}^+$ ,  $b_{-\mathbf{k}}^+$  y su cruzado  $b_{\mathbf{k}}^+ b_{-\mathbf{k}}^+$ .

$$b_{\mathbf{k}}^\dagger |\bar{\varphi}_{\mathbf{k}}\rangle = [ |u_{\mathbf{k}}|^2 a_{\mathbf{k},\uparrow}^\dagger - |v_{\mathbf{k}}|^2 a_{-\mathbf{k},\downarrow} a_{\mathbf{k},\uparrow}^\dagger a_{-\mathbf{k},\downarrow}^\dagger ] |0\rangle = [ |u_{\mathbf{k}}|^2 a_{\mathbf{k},\uparrow}^\dagger + |v_{\mathbf{k}}|^2 a_{\mathbf{k},\uparrow}^\dagger ] |0\rangle = a_{\mathbf{k},\uparrow}^\dagger |0\rangle$$

$$|\bar{\varphi}_{\mathbf{k}}\rangle^e = b_{\mathbf{k}}^\dagger b_{-\mathbf{k}}^\dagger |\bar{\varphi}_{\mathbf{k}}\rangle = [ u_{\mathbf{k}}^* a_{\mathbf{k},\uparrow}^\dagger a_{-\mathbf{k},\downarrow}^\dagger - v_{\mathbf{k}}^* ] |0\rangle$$

Algo similar puede hacerse para bosones, sólo que ahora los  $b_{\pm\mathbf{k}}^+$  pueden operar un número cualquiera de veces (esto sale de sus relaciones de conmutación).

# Vacío de Cuasipartículas – Transf. de Bogolubov

Notemos que, independientemente de si se trata de bosones o fermiones, los operadores  $b^+$  generan estados ortogonales cuando operan sobre  $|\Psi_{\text{paired}}\rangle$ . Esto es porque combinan un operador de creación con otro de destrucción: sobre un estado de  $N$  partículas, generan dos estados nuevos, uno con  $N-1$  y otro con  $N+1$ .

Mismo espín (bosones o fermiones)

$$|\Psi_{\text{paired}}\rangle = \left\{ \prod_{\otimes \mathbf{k} \in D} \exp \left[ \sqrt{2} g_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}}^{\dagger} a_{-\mathbf{k}}^{\dagger} \right] \right\} |0\rangle$$

Fermiones (distinto espín)

$$|\Psi_{\text{paired}}\rangle = \exp \left\{ \sum g_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k},\uparrow}^{\dagger} a_{-\mathbf{k},\downarrow}^{\dagger} \right\} |0\rangle = \prod_{\otimes \mathbf{k}} |\varphi_{\mathbf{k}}\rangle$$

# Vacío de Cuasipartículas – Transf. de Bogolubov

Los operadores  $b_{\mathbf{k}}^+$  crean “excitaciones” sobre un “vacío” que es  $|\Psi_{\text{paired}}\rangle$ , y satisfacen, por construcción, las mismas relaciones de conmutación que los operadores  $c^+$  y  $c$  (o  $a$  y  $a^+$ ) de bosones y fermiones. Podemos pensar entonces en términos de “cuasipartículas” que son creadas (y destruidas) por estos operadores sobre un vacío  $|\Psi_{\text{paired}}\rangle$ .

Por analogía, entonces, con el caso de partículas individuales que vimos, en el que teníamos

$\hat{H}_0 = \sum_i (\hbar\omega_i) a_i^\dagger a_i \quad a_i |\Phi_0\rangle = 0$  podemos definir un Hamiltoniano “diagonal” en los  $b$ , como si no hubiera interacciones y cuyo “ground” fuera  $|\Psi_{\text{paired}}\rangle$ :

$$\hat{H}_B = \sum_{\mathbf{k} \in D} \hbar\omega_{\mathbf{k}} \left[ b_{\mathbf{k}}^\dagger b_{\mathbf{k}} + b_{-\mathbf{k}}^\dagger b_{-\mathbf{k}} \right]$$

$$\begin{aligned} [b_{\mathbf{k}}, b_{\mathbf{k}}^\dagger]_{-\eta} &= 1 \\ [b_{-\mathbf{k}}, b_{-\mathbf{k}}^\dagger]_{-\eta} &= 1 \end{aligned} \begin{cases} \rightarrow \hat{n}(b_{\mathbf{k}}) = b_{\mathbf{k}}^\dagger b_{\mathbf{k}} \\ \rightarrow \hat{n}(b_{-\mathbf{k}}) = b_{-\mathbf{k}}^\dagger b_{-\mathbf{k}} \end{cases}$$

Esta interpretación es útil para hacer aproximaciones y poder reducir términos de 4 operadores (i.e., interacciones), cuando sea posible, a otros de sólo 2.

# Moraleja

Al margen de la idea de pares, vemos que las transformaciones de Bogolubov son más generales. La idea de combinar linealmente operadores de creación y destrucción puede ayudar a reinterpretar un Hamiltoniano con interacciones en términos de nuevas partículas, o bien puede servir como herramienta de cálculo para diagonalizar o hacer cálculos computacionales (mucho de esto está discutido en el Cohen).

# Referencia

## Cohen-Tannoudji — Volumen III

- Cap. XVII — §§ A, B, E (p. 1811)
- Comp. C<sub>XVII</sub>, §4-b, p. 1920 (BCS)