

CLASE 2 – Segunda Cuantización

Ya repasamos el formalismo de partículas idénticas: Capítulo XIV de CT-D-L.

Ahora empezamos a ver una formulación diferente del mismo problema, llamada Segunda Cuantización: sigo el Capítulo XV de CT-D-L, que está en el reciente Volumen III (salió en 2017 en francés).

Tenemos varios libros en nuestra bibliografía, todos explican esto de manera ligeramente diferente.

Pueden leerlo también (sería útil) del libro de **Gross, Runge y Heinonen (GRH)**, que será nuestro texto principal más adelante: Capítulo 2

En el **Ballentine** también está muy bien (Sección 17.4).

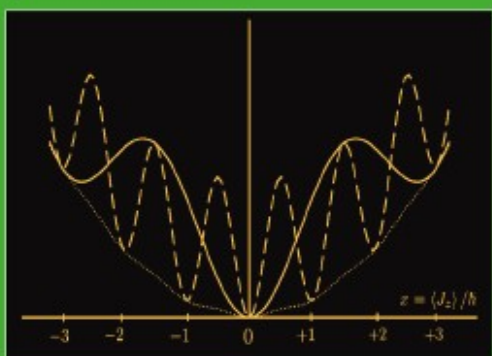
SAVOIRS

PHYSIQUE

ACTUELS

MÉCANIQUE QUANTIQUE – TOME III ●

FERMIONS, BOSONS, PHOTONS,
CORRÉLATIONS ET INTRICATION



●
CLAUDE COHEN-TANNOUJJI
BERNARD DIU
FRANCK LALOË

CNRS ÉDITIONS



edp sciences

Números de ocupación

Espacio de Hilbert de N partículas (producto tensorial):

$$\mathcal{E}_N = \mathcal{E}_1(1) \otimes \mathcal{E}_1(2) \otimes \dots \otimes \mathcal{E}_1(N)$$

↓

$$S_N = \frac{1}{N!} \sum_{\alpha} P_{\alpha} \longrightarrow \mathcal{E}_S(N) \quad \text{Bosones}$$
$$A_N = \frac{1}{N!} \sum_{\alpha} \varepsilon_{\alpha} P_{\alpha} \longrightarrow \mathcal{E}_A(N) \quad \text{Fermiones}$$

Proyectores

Partimos de una base de estados de partícula única: $\{|u_k\rangle\}$ (en general la base tiene infinitos estados)

Un estado producto de N partículas está dado por números de ocupación: n_i

$$\longrightarrow n_1 + n_2 + \dots + n_k + \dots = N \quad \text{algunos pueden ser } = 0 \dots$$

Otra forma de pensarlo es sólo dar los números de ocupación que no son nulos:

$$n_i, n_j, \dots, n_l, \dots \longrightarrow \text{están ocupados: } |u_i\rangle \quad |u_j\rangle \quad \dots \text{ etc.}$$

Estados de Fock o “de número de ocupación” (number states)

Estados con números de partículas bien determinados

Bosones:

$$|n_i, n_j, \dots, n_l, \dots\rangle = \sqrt{\frac{N!}{n_i! n_j! \dots n_l! \dots}} S_N | \underbrace{1 : u_i; 2 : u_i; \dots; n_i : u_i}_{|u_i\rangle}; \underbrace{n_i + 1 : u_j; \dots; n_i + n_j : u_j; \dots}_{|u_j\rangle} \rangle$$

Notaciones alternativas: $\left\{ \begin{array}{l} |n_1, n_2, \dots, n_i, \dots, n_l, \dots\rangle \quad \text{Incluir todas las ocupaciones (incluso nulas)} \\ |u_i, u_i, \dots, u_j, u_j, \dots, u_l, \dots\rangle \quad \text{Listar estados ocupados} \end{array} \right.$

Un estado general de N partículas será una combinación lineal de “number states”.
(Químicos: CI, o Configuration Interaction)

Ejercicio: escribir algunos de los estados del ejercicio 1 del capítulo XIV de CT-D-L en estas 3 notaciones.

Estados de Fock o “de número de ocupación” (number states)

Fermiones: las ocupaciones sólo pueden ser 0 o 1

Si los estados u “orbitales” ocupados son: $|u_i\rangle, |u_j\rangle, \dots, |u_l\rangle, \dots$

$$|u_i, u_j, \dots, u_l, \dots\rangle = \begin{cases} \sqrt{N!} A_N |1 : u_i; 2 : u_j; \dots; q : u_l; \dots\rangle & \text{si todos los } u_i \text{ son diferentes} \\ 0 & \text{si hay repetidos} \end{cases}$$

Para fermiones entonces lo importante es especificar qué orbitales están ocupados.

Notar que para fermiones el orden de los estados es importante porque:

$$|u_j, u_i, \dots, u_l, \dots\rangle = -|u_i, u_j, \dots, u_l, \dots\rangle$$

Hay que adoptar una convención, un orden para los orbitales de la base de partícula única antes de empezar a trabajar.

Espacio de Fock

Teníamos $\mathcal{E}_{S,A}(N)$ para sistemas de N partículas

Los juntamos en un solo espacio, **suma directa** de ellos:

$$\mathcal{E}_{Fock}^S = \mathcal{E}_S(0) \oplus \mathcal{E}_S(1) \oplus \mathcal{E}_S(2) \oplus \dots \oplus \mathcal{E}_S(N) \oplus \dots$$

$$\mathcal{E}_{Fock}^A = \mathcal{E}_A(0) \oplus \mathcal{E}_A(1) \oplus \mathcal{E}_A(2) \oplus \dots \oplus \mathcal{E}_A(N) \oplus \dots$$

El subespacio $\mathcal{E}_{S,A}(0)$ tiene un solo estado, el vacío: $|0\rangle = |\text{vac}\rangle$

- Notar que es **suma**, no **producto** tensorial.
- Un estado genérico es una combinación lineal donde “conviven” estados con diferentes números de partículas.
- Estados con diferente N son ortogonales entre sí.

Espacio de Fock

Los espacios de Fock:

$$\mathcal{E}_{Fock}^S = \mathcal{E}_S(0) \oplus \mathcal{E}_S(1) \oplus \mathcal{E}_S(2) \oplus \dots \oplus \mathcal{E}_S(N) \oplus \dots$$

$$\mathcal{E}_{Fock}^A = \mathcal{E}_A(0) \oplus \mathcal{E}_A(1) \oplus \mathcal{E}_A(2) \oplus \dots \oplus \mathcal{E}_A(N) \oplus \dots$$

van a ser una herramienta matemática útil a pesar de que la física de nuestros sistemas **conserva el número de partículas**.

A velocidades relativistas se hace posible la creación y destrucción de partículas. El formalismo ya queda bien planteado para estudiar esos sistemas también.

Pero ahora vemos porque es necesario el espacio de Fock aunque se conserve el número de partículas

Operador de **creación** de partículas: BOSONES

Dada una base $\{|u_i\rangle\}$ definimos el operador de creación: $a_{u_i}^\dagger$

$$a_{u_i}^\dagger |n_1, n_2, \dots, n_i, \dots\rangle = \sqrt{n_i + 1} |n_1, n_2, \dots, n_i + 1, \dots\rangle$$

$$a_{u_i}^\dagger : \mathcal{E}_S(N) \longrightarrow \mathcal{E}_S(N + 1)$$


Podemos generar cualquier estado aplicando repetidamente $a_{u_i}^\dagger$

a partir del vacío:

$$|n_1, n_2, \dots, n_i, \dots\rangle = \frac{1}{\sqrt{n_1! n_2! \dots n_i! \dots}} [a_{u_1}^\dagger]^{n_1} [a_{u_2}^\dagger]^{n_2} \dots [a_{u_i}^\dagger]^{n_i} \dots |0\rangle$$

Similar a lo que pasaba en el oscilador armónico en varias dimensiones. Ver Ec. (21) del Complemento E_v

Operador de **creación** de partículas: FERMIONES

$$a_{u_i}^\dagger |u_j, \dots, u_k, \dots, u_l, \dots\rangle = |u_i, u_j, \dots, u_k, \dots, u_l, \dots\rangle$$


Agrega una partícula en u_i al comienzo de la lista.

Si el orbital ya está ocupado entonces da cero:

$$a_{u_i}^\dagger |u_j, \dots, u_i, \dots, u_l, \dots\rangle = |u_i, u_j, \dots, u_i, \dots, u_l, \dots\rangle = 0$$

Vale también para fermiones:

$$a_{u_i}^\dagger |n_1, n_2, \dots, n_i, \dots\rangle = \sqrt{n_i + 1} |n_1, n_2, \dots, n_i + 1, \dots\rangle$$

$$|n_1, n_2, \dots, n_i, \dots\rangle = \frac{1}{\sqrt{n_1! n_2! \dots n_i! \dots}} [a_{u_1}^\dagger]^{n_1} [a_{u_2}^\dagger]^{n_2} \dots [a_{u_i}^\dagger]^{n_i} \dots |0\rangle$$

Pero acá todos los números de ocupación son 0 o 1, y si no, ambos lados de la ecuación son nulos.

Operador de **destrucción** : BOSONES

Teníamos: $a_{u_i}^\dagger |n_1, n_2, \dots, n_i, \dots\rangle = \sqrt{n_i + 1} |n_1, n_2, \dots, n_i + 1, \dots\rangle$

$$\longrightarrow \langle n_1, n_2, \dots, n_i + 1, \dots | a_{u_i}^\dagger |n_1, n_2, \dots, n_i, \dots\rangle = \sqrt{n_i + 1}$$

Tomando el complejo conjugado:

$$\langle n_1, n_2, \dots, n_i, \dots | a_{u_i} |n_1, n_2, \dots, n_i + 1, \dots\rangle = \sqrt{n_i + 1}$$

O sea que: $a_{u_i} |n_1, n_2, \dots, n_i, \dots\rangle = \sqrt{n_i} |n_1, n_2, \dots, n_i - 1, \dots\rangle$

Destruye una partícula en el orbital *i*

Notar que: $a_{u_i} |0\rangle = 0$ En el vacío ya no hay partículas para destruir

Operador de **destrucción** : FERMIONES

Teníamos: $a_{u_i}^\dagger |u_j, \dots, u_k, \dots, u_l, \dots\rangle = |u_i, u_j, \dots, u_k, \dots, u_l, \dots\rangle$

$$\longrightarrow \langle u_i, u_j, \dots, u_k, \dots, u_l, \dots | a_{u_i}^\dagger |u_j, \dots, u_k, \dots, u_l, \dots\rangle = 1$$

Tomando el complejo conjugado:

$$a_{u_i} |u_i, u_j, u_k, \dots, u_l, \dots\rangle = |u_j, u_k, \dots, u_l, \dots\rangle$$

Destruye una partícula en el orbital i , que tiene que estar ubicado al comienzo de la lista. Si no lo está, hay que llevarlo ahí, con un posible cambio de signo.

$$a_{u_i} |u_j, u_k, \dots, u_l, \dots\rangle = 0$$

Si el orbital i no está ocupado.

Usando la otra notación:

$$a_{u_i} |n_1, n_2, \dots, n_i, \dots\rangle = \sqrt{n_i} |n_1, n_2, \dots, n_i - 1, \dots\rangle$$

Operador NÚMERO DE OCUPACIÓN

$$\hat{n}_{u_i} = a_{u_i}^\dagger a_{u_i}$$

Primero destruye y después repone, y gracias a los factores cuenta la ocupación del estado i

$$\hat{c}_k^\dagger \hat{c}_k | n_1, n_2, \dots \rangle = n_k | n_1, n_2, \dots \rangle$$

Sorry, pequeño cambio de notación:
Gross, Runge y Heinen

Operador **Número Total** de partículas:

$$\hat{N} = \sum_i \hat{n}_{u_i} = \sum_i a_{u_i}^\dagger a_{u_i}$$

Relaciones de **conmutación y anticonmutación**

Notación simplificada: $a_{u_i} \longrightarrow a_i$

BOSONES:

$$[a_i, a_j] = 0 \qquad [a_i^\dagger, a_j^\dagger] = 0 \qquad [a_i, a_j^\dagger] = \delta_{ij}$$

FERMIONES:

$$[a_i, a_j]_+ = 0 \qquad [a_i^\dagger, a_j^\dagger]_+ = 0 \qquad [a_i, a_j^\dagger]_+ = \delta_{ij}$$

Anticonmutador. También usamos: { , }

Notación general:

$$[A, B]_{-\eta} = AB - \eta BA \quad \left\{ \begin{array}{l} \eta = 1 \quad \text{pour des bosons} \\ \eta = -1 \quad \text{pour des fermions} \end{array} \right.$$

Relaciones de conmutación y anticonmutación

Ejercicios:

1. Demostrar las reglas de anticonmutación (conmutación) que satisfacen los operadores de creación y aniquilación de fermiones (bosones).

o hacer trampa y seguir la demostración en el libro de GRH o el de CT-D-L (vol. III)

2. Demostrar que para operadores fermiónicos se satisface:

$$[a_i^\dagger a_j, a_k^\dagger a_l] = \delta_{jk} a_i^\dagger a_l - \delta_{il} a_k^\dagger a_j \quad (1)$$

Calcular el mismo conmutador para bosones.

3. Trabajar el conmutador:

$$[a_1^\dagger a_2, a_3^\dagger a_4^\dagger a_5 a_6] \quad (2)$$

para fermiones y bosones, hasta reducirlo a la suma de productos de cuatro operadores (ver ecuación (10.18) del libro de Haug y Koch).

4. Escribir algunos de los estados del ejercicio 1 del capítulo XIV de CT-D-L en las 3 notaciones usadas para designar estados de Fock ("number states").