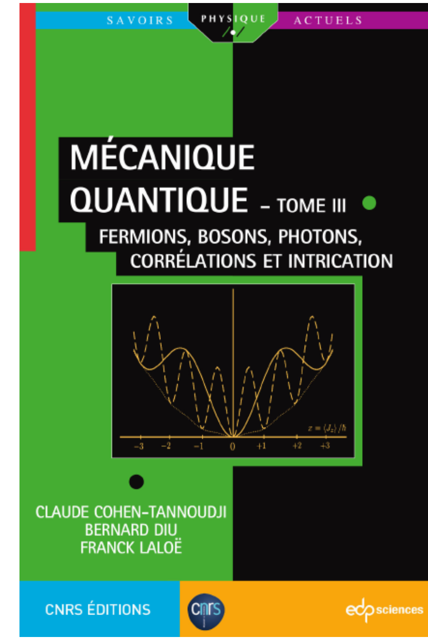
# Segunda cuantización




Seguimos avanzando con el formalismo de segunda cuantización.

Nos faltan dos temas importantes:

0) Cambio de base ←→ Operadores de creación y destrucción

1) **Operadores de campo** – creación y destrucción de partículas en posiciones del espacio real

2) Forma de los **operadores de cantidades físicas**:

   a) operadores de partícula única

   b) operadores de dos partículas (interacciones)

# Cambio de base

Teníamos: $\{|u_i\rangle\} \longrightarrow a^\dagger_{u_i}$ y $a_{u_i}$

?

Con otra base: $\{|v_s\rangle\} \longrightarrow a^\dagger_{v_s}$ y $a_{v_s}$

Veamos un argumento simple para explorar la relación: aplico el operador de creación sobre el vacío:

$$a^\dagger_{v_s}|0\rangle = |1:v_s\rangle = \sum_i \langle u_i|\, v_s\rangle\, |1:u_i\rangle = \sum_i \langle u_i|\, v_s\rangle\, a^\dagger_{u_i}|0\rangle$$

$$\longrightarrow \boxed{a^\dagger_{v_s} = \sum_i \langle u_i|\, v_s\rangle \;\; a^\dagger_{u_i}} \quad \xrightarrow{\text{conjugar:}} \quad \boxed{a_{v_s} = \sum_i \langle v_s|\, u_i\rangle \;\; a_{u_i}}$$

No es una demostración pero nos da el resultado correcto. Demostración completa en CT-D-L vol. 3

# Cambio de base: chequeo relaciones de conmutación

$$\boxed{a^\dagger_{v_s} = \sum_i \langle u_i | \, v_s \rangle \;\; a^\dagger_{u_i}}$$

$$\boxed{a_{v_s} = \sum_i \langle v_s | \, u_i \rangle \;\; a_{u_i}}$$

Chequeamos que las relaciones de conmutación siguen valiendo:

$$\left[a_{v_s}, a^\dagger_{v_t}\right]_{-\eta} = \sum_{i,j} \langle v_s | \, u_i \rangle \langle u_j | \, v_t \rangle \underbrace{\left[a_{u_i}, a^\dagger_{u_j}\right]_{-\eta}}_{} = \sum_{i,j} \langle v_s | \, u_i \rangle \langle u_j | \, v_t \rangle \underbrace{\delta_{ij}}_{}$$

$$= \sum_i \langle v_s | \, u_i \rangle \langle u_i | \, v_t \rangle = \delta_{st}$$

como esperábamos

# Operadores en segunda cuantización

Hasta ahora vimos:

estados en el espacio de Fock

operadores de creación y destrucción de partículas

operador número de ocupación

Ahora necesitamos los operadores asociados a **observables físicos**.

Veremos que se expresan todos con los $a_i$ y $a_i^\dagger$

**OPERADORES**

de una partícula (energía, momento, etc)

de dos partículas (interacciones entre partículas)

# Operadores de una partícula

Sea $\widehat{f}$ un operador de una partícula sola. (Por ejemplo: energía cinética, momento lineal, momento angular, etc)

Para N partículas, en **“primera cuantizacion”** tenemos: $\widehat{F}^{(N)} = \sum_{q=1}^{N} \widehat{f}(q)$

En una base $\{|u_i\rangle\}$ tenemos elementos de matriz: $f_{kl} = \langle u_k|\, \widehat{f}\, |u_l\rangle$

Para la partícula “q” podemos escribir el operador como:

$$\widehat{f}(q) = \sum_{k,l} |q:u_k\rangle \langle q:u_k|\, \widehat{f}(q)\, |q:u_l\rangle \langle q:u_l| = \sum_{k,l} f_{kl}\; |q:u_k\rangle \langle q:u_l|$$

$$\longrightarrow \quad \widehat{F}^{(N)} = \sum_{k,l} f_{kl} \sum_{q=1}^{N} |q:u_k\rangle \langle q:u_l|$$

en primera cuantizacion

# Operadores de una partícula

$$\widehat{F}^{(N)} = \sum_{k,l} f_{kl} \sum_{q=1}^{N} |q : u_k\rangle \langle q : u_l|$$

$$\widehat{F}^{(N)} \quad ; \quad N = 1, 2, 3, \ldots \qquad \Longrightarrow \widehat{F}$$

Actúa en el espacio de Fock completo

Ver CT-D-L o Ballentine

$$\boxed{\widehat{F} = \sum_{k,l} \langle u_k | \,\widehat{f}\, | u_l \rangle \;\; a_k^{\dagger} a_l}$$

**UTIL:** haciendo un cambio de base, a la base de autoestados del operador *f*, tenemos: $f_{kl} \;= f_k \times \delta_{kl}$

y entonces: $\widehat{F} = \sum_{k} \; f_k \;\; a_k^{\dagger} a_k = \sum_{k} \; f_k \;\; \widehat{n}_k$

# Ejemplos de operadores de una partícula

**Operador número de partículas:**

$$\widehat{N} = \sum_i \widehat{n}_i = \sum_i a_i^\dagger a_i$$

Aunque está definido sobre una base particular, no depende de ella:

$$\sum_i a_{u_i}^\dagger a_{u_i} = \sum_i \sum_{s,t} \langle v_s | u_i \rangle \langle u_i | v_t \rangle \; a_{v_s}^\dagger a_{v_t} = \sum_{s,t} \delta_{st} \; a_{v_s}^\dagger a_{v_t}$$

$$\longrightarrow \quad \widehat{N} = \sum_i a_{u_i}^\dagger a_{u_i} = \sum_s a_{v_s}^\dagger a_{v_s}$$

# Ejemplos de operadores de una partícula

**Operador densidad:**

En primera cuantización: $\widehat{f} = |\mathbf{r}_0\rangle \langle \mathbf{r}_0|$

Partiendo de la ecuación general: $\widehat{F} = \sum_{k,l} \langle u_k | \, \widehat{f} \, | u_l \rangle \;\; a_k^\dagger a_l$

Obtenemos: $\widehat{D}(\mathbf{r}_0) = \sum_{k,l} u_k^*(\mathbf{r}_0) u_l(\mathbf{r}_0) \;\; a_k^\dagger a_l$

Operador densidad local de partículas

# Ejemplos de operadores de una partícula

## Momento lineal

Trabajamos con la base: $|\mathbf{k}_i\rangle \longrightarrow a_{\mathbf{k}_i}$

(las ondas planas)

Como es la base de autoestados del momento, queda: $\widehat{F} = \sum_{k,l} \langle u_k | \, \widehat{f} \, | u_l \rangle \;\; a_k^\dagger a_l$

$$\boxed{\widehat{\mathbf{P}} = \sum_{\mathbf{k}_i} \hbar \mathbf{k}_i \;\, a_{\mathbf{k}_i}^\dagger a_{\mathbf{k}_i} = \sum_{\mathbf{k}_i} \hbar \mathbf{k}_i \;\, \widehat{n}_{\mathbf{k}_i}}$$

Y la energía cinética:

$$\boxed{\widehat{H}_0 = \sum_{\mathbf{k}_i} \frac{\hbar^2 \mathbf{k}_i^2}{2m} \;\, a_{\mathbf{k}_i}^\dagger a_{\mathbf{k}_i} = \sum_{\mathbf{k}_i} \frac{\hbar^2 \mathbf{k}_i^2}{2m} \;\, \widehat{n}_{\mathbf{k}_i}}$$

# Operadores de dos partículas

Supongamos una cantidad física que involucra dos partículas, q y q':

En primera cuantización, actuando en el espacio producto de 2 partículas:

$$\widehat{g}(q, q')$$

Para N partículas tenemos que sumar sobre las partículas:

$$\widehat{G}^{(N)} = \frac{1}{2} \sum_{q,q'=1;\ q\neq q'}^{N} \widehat{g}(q, q') \ = \sum_{q<q'}^{N} \widehat{g}(q, q')$$

$$\widehat{g}(q, q') = \widehat{g}(q', q)$$

Extendemos al espacio de Fock: $\widehat{G}^{(N)} \quad ; \quad N = 1, 2, 3, \ldots \quad \Longrightarrow \widehat{G}$

# Operadores de dos partículas

$$\widehat{G}^{(N)} = \frac{1}{2} \sum_{q,q'=1;\ q\neq q'}^{N} \widehat{g}(q,q') \ = \sum_{q<q'}^{N} \widehat{g}(q,q')$$

Tenemos que pasar a segunda cuantización:

$$\boxed{\widehat{G} = \frac{1}{2} \sum_{i,j,k,l} \langle 1 : u_i;\ 2 : u_j | \, \widehat{g}(1,2) \, | 1 : u_k;\ 2 : u_l \rangle \ a_i^\dagger a_j^\dagger a_l a_k}$$

Ahora **hay 4 operadores de creación y destrucción.**

Notar el cambio de orden en *k* y *l*, es importante para fermiones.

Para bosones es irrelevante por la conmutación de operadores de destrucción.

De nuevo me salteo la demostración; hay varias demostraciones distintas en

en los textos que manejamos.

# Operador de campo

QUANTUM THEORY OF MANY-PARTICLE SYSTEMS

ALEXANDER L. FETTER
Associate Professor of Physics
Stanford University

JOHN DIRK WALECKA
Professor of Physics
Stanford University

Definimos los operadores de campo:

$$\hat{\psi}(\mathbf{x}) \equiv \sum_k \psi_k(\mathbf{x})\, c_k$$

$$\hat{\psi}^\dagger(\mathbf{x}) \equiv \sum_k \psi_k(\mathbf{x})^\dagger\, c_k^\dagger$$

El índice *k* representa un conjunto de números cuánticos: $\{\mathbf{k}, s_z\}$ or $\{E, L, J, M\}$

Para un espin ½, notar que los "coeficientes" son espinores:

$$\psi_k(\mathbf{x}) = \begin{bmatrix} \psi_k(\mathbf{x})_1 \\ \psi_k(\mathbf{x})_2 \end{bmatrix} \equiv \psi_k(\mathbf{x})_\alpha \qquad \alpha = 1,2$$

$\boxed{\hat{\psi}_\alpha^\dagger(\mathbf{x}) \text{ crea una partícula en la posición } \mathbf{x} \text{ con espín } \alpha}$

# Operador de campo

$$\hat{\psi}(\mathbf{x}) \equiv \sum_k \psi_k(\mathbf{x})\, c_k$$

$$\hat{\psi}^\dagger(\mathbf{x}) \equiv \sum_k \psi_k(\mathbf{x})^\dagger\, c_k^\dagger$$

$$\psi_k(\mathbf{x}) = \begin{bmatrix} \psi_k(\mathbf{x})_1 \\ \psi_k(\mathbf{x})_2 \end{bmatrix} \equiv \psi_k(\mathbf{x})_\alpha \qquad \alpha = 1,2$$

Las componentes de ellos satisfacen las mismas reglas de conmutación (bosones)

Y anti-conmutación (fermiones):

$$[\hat{\psi}_\alpha(\mathbf{x}), \hat{\psi}_\beta^\dagger(\mathbf{x}')]_\mp = \sum_k \psi_k(\mathbf{x})_\alpha\, \psi_k(\mathbf{x}')_\beta^* = \delta_{\alpha\beta}\, \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}')$$

$$[\hat{\psi}_\alpha(\mathbf{x}), \hat{\psi}_\beta(\mathbf{x}')]_\mp = [\hat{\psi}_\alpha^\dagger(\mathbf{x}), \hat{\psi}_\beta^\dagger(\mathbf{x}')]_\mp = 0$$

# Operador de campo: aplicaciones importantes

Operador general de una partícula en 1era cuantización: $J = \sum_{i=1}^{N} J(\mathbf{x}_i)$

$$\hat{J} = \sum_{rs} \langle r | J | s \rangle c_r^\dagger c_s$$
$$= \int d^3x \sum_{rs} \psi_r(\mathbf{x})^\dagger J(\mathbf{x}) \psi_s(\mathbf{x}) c_r^\dagger c_s$$
$$= \int d^3x \, \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{x}) J(\mathbf{x}) \hat{\psi}(\mathbf{x})$$

**Ejercicio:** demostrar a partir de la fórmula general:

$$\hat{H} = \sum_{ij} b_i^\dagger \langle i | T | j \rangle b_j + \tfrac{1}{2} \sum_{ijkl} b_i^\dagger b_j^\dagger \langle ij | V | kl \rangle b_l b_k$$

$$\hat{H} = \int d^3x \, \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{x}) T(\mathbf{x}) \hat{\psi}(\mathbf{x}) + \tfrac{1}{2} \iint d^3x \, d^3x' \, \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{x}) \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{x}') V(\mathbf{x},\mathbf{x}') \hat{\psi}(\mathbf{x}') \hat{\psi}(\mathbf{x}) \tag{2.4}$$

# Operador de campo: aplicaciones importantes

Dijimos: $\hat{J} = \int d^3x\, \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{x}) J(\mathbf{x}) \hat{\psi}(\mathbf{x})$

Operador densidad de partículas: $n(\mathbf{x}) = \sum_{i=1}^{N} \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}_i)$

$$\hat{n}(\mathbf{x}) = \sum_{rs} \psi_r(\mathbf{x})^\dagger \psi_s(\mathbf{x})\, c_r^\dagger c_s = \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{x})\, \hat{\psi}(\mathbf{x})$$

Operador número total de partículas: $\hat{N} = \int d^3x\, \hat{n}(\mathbf{x}) = \sum_r c_r^\dagger c_r = \sum_r \hat{n}_r$

$$= \int d^3x\, \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{x})\, \hat{\psi}(\mathbf{x})$$

because of the orthonormality of the single-particle wave functions. The number operator commutes with the hamiltonian of Eq. (2.4), as can be verified by using either the commutation rules for the creation and destruction operators or those of the field operators. This result is physically obvious since the ordinary Schrödinger hamiltonian does not change the total number of particles. We infer that $\hat{N}$ is a constant of the motion and can be diagonalized simultaneously with the hamiltonian. Thus the problem in the abstract Hilbert space separates into a sequence of problems in the subspaces corresponding to a fixed total number of particles. Nevertheless, *the abstract Hilbert space contains states with any number of particles.*

# Ejercicio

**1.1.** Prove that the number operator $\hat{N} = \int \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{x})\hat{\psi}(\mathbf{x})\,d^3x$ commutes with the hamiltonians of Eqs. (1.42) and (1.60).

$$\hat{H} = \sum_{ij} b_i^\dagger \langle i|T|j\rangle b_j + \tfrac{1}{2}\sum_{ijkl} b_i^\dagger b_j^\dagger \langle ij|V|kl\rangle b_l b_k \tag{1.42}$$

$$\hat{H} = \sum_{rs} a_r^\dagger \langle r|T|s\rangle a_s + \tfrac{1}{2}\sum_{rstu} a_r^\dagger a_s^\dagger \langle rs|V|tu\rangle a_u a_t \tag{1.60}$$

Son lo mismo, para bosones y fermiones ...