

La clase pasada vimos:

Segunda cuantización para fermiones

Estados de N fermiones

Representación de número de ocupación

Operadores de destrucción y creación

En esta clase veremos:

Operadores de partícula única en segunda cuantización

Operador de energía cinética: forma diagonal

Operadores de dos partículas: interacciones

Sistemas con invariancia translacional

REPASO

Introducción al formalismo de **segunda cuantización**

El problema de N partículas se trabaja a partir del problema de una partícula.

Por comodidad llamamos “orbitales” a los estados de partícula única.

Por ejemplo, los conocidos estados del átomo de hidrógeno incluyendo el espín up o down.

Pueden ser estados de cualquier base del problema de una partícula: ondas planas (partícula libre), autoestados de un pozo cuántico, etc.

Vimos la notación abreviada para un determinante de Slater general --- Lista de orbitales ocupados:

$$\begin{aligned} \mathbf{c} &= (c_1, c_2, \dots, c_N) & c_i &\in \mathcal{N} \\ \langle \mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N | \mathbf{c} \rangle &= \Phi_{\mathbf{c}}(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N) & c_1 &< c_2 < \dots < c_N \end{aligned}$$

Ejemplo: $\mathbf{c} = (1, 4) \Rightarrow \Phi_{\mathbf{c}}^{(A)}(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{vmatrix} \phi_1(\mathbf{x}_1) & \phi_1(\mathbf{x}_2) \\ \phi_4(\mathbf{x}_1) & \phi_4(\mathbf{x}_2) \end{vmatrix}$

$$E_{\text{total}} = E_1 + E_4$$

Introducción al formalismo de segunda cuantización

REPASO

Representación de *números de ocupación*:

$$\boxed{|c\rangle \equiv |n_1, n_2, n_3, \dots\rangle} \quad \text{donde} \quad \begin{cases} n_i = 0 \text{ if } i \notin \{c_1, \dots, c_N\} \\ n_i = 1 \text{ if } i \in \{c_1, \dots, c_N\} \end{cases}$$

Cantidad de 0's y 1's : tamaño del espacio de Hilbert de una partícula

$$\hat{c}_k |n_1, \dots, n_k, \dots\rangle = \theta_k n_k |n_1, \dots, 0_k, \dots\rangle \quad \text{Operador de destrucción}$$

$$\hat{c}_k^\dagger |n_1, \dots, n_k, \dots\rangle = \theta_k (1 - n_k) |n_1, \dots, 1_k, \dots\rangle \quad \text{Operador de creación}$$

Reglas de anticonmutación
para operadores fermiónicos:

$$\begin{aligned} \{\hat{c}_\ell, \hat{c}_k\} &= 0 \\ \{\hat{c}_\ell^\dagger, \hat{c}_k^\dagger\} &= 0 \\ \{\hat{c}_\ell^\dagger, \hat{c}_k\} &= \delta_{\ell, k} \end{aligned}$$

REPASO

Operadores en segunda cuantización

Operador **ocupación** del orbital k : $\hat{n}_k \equiv \hat{c}_k^\dagger \hat{c}_k$

Operador **número de partículas** : $\hat{N} \equiv \sum_{k=1}^{\infty} \hat{n}_k = \sum_{k=1}^{\infty} \hat{c}_k^\dagger \hat{c}_k$

Operadores en general (no llegamos la vez pasada ...)

(1) for single-particle operators

$$\hat{H}_0 = \sum_{i=1}^N \hat{h}(x_i) = \sum_{i,j=1}^{\infty} \langle i | \hat{h} | j \rangle \hat{c}_i^\dagger \hat{c}_j$$

with $\langle i | \hat{h} | j \rangle = \int \phi_i^*(x) \hat{h}(x) \phi_j(x) dx$; and

(2) for local two-particle operators

$$\hat{V} = \frac{1}{2} \sum_{\substack{i,j=1 \\ i \neq j}}^N \hat{v}(x_i, x_j) = \frac{1}{2} \sum_{ijkl=1}^{\infty} \langle ij | \hat{v} | k\ell \rangle \hat{c}_i^\dagger \hat{c}_j^\dagger \hat{c}_\ell \hat{c}_k$$

with $\langle ij | \hat{v} | k\ell \rangle = \int \int \phi_i^*(x) \phi_j^*(x') v(x, x') \phi_k(x) \phi_\ell(x') dx dx'$.

Operadores de partícula única

Operadores de partícula única

for single-particle operators

$$\hat{H}_0 = \sum_{i=1}^N \hat{h}(x_i) = \sum_{i,j=1}^{\infty} \langle i | \hat{h} | j \rangle \hat{c}_i^\dagger \hat{c}_j$$

En primera cuantización
sumamos sobre las partículas,
de 1 a N

Operadores de partícula única
en primera cuantización

Elemento de matriz
del operador de partícula única

Operadores de creación
y destrucción

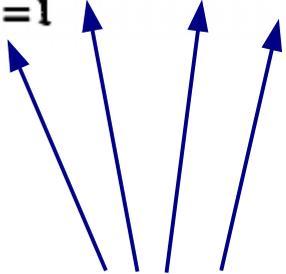
Operador en segunda cuantización

Notación abreviada: $x = (\mathbf{r}, s)$

$$\int dx = \sum_s \int d^3r$$

Operadores de partícula única

for single-particle operators

$$\hat{H}_0 = \sum_{i=1}^N \hat{h}(x_i) = \sum_{i,j=1}^{\infty} \langle i | \hat{h} | j \rangle \hat{c}_i^\dagger \hat{c}_j$$


Notar: suma sobre orbitales

No aparece el número de partículas

Operadores de partícula única

for single-particle operators

$$\hat{H}_0 = \sum_{i=1}^N \hat{h}(x_i) = \sum_{i,j=1}^{\infty} \langle i | \hat{h} | j \rangle \hat{c}_i^\dagger \hat{c}_j$$

with $\langle i | \hat{h} | j \rangle = \int \phi_i^*(x) \hat{h}(x) \phi_j(x) dx$; and

Tenemos que elegir los “orbitales” $\phi_j(x)$

De nuevo: son estados de partícula única, y definen la acción de los operadores de creación y destrucción, que crean o destruyen una partícula en esos estados

Operadores de partícula única

Ejemplo fundamental:

Sea el Hamiltoniano de una partícula libre: $\hat{h} = \frac{p^2}{2m} = -\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m}$

Sus autoestados son: $\phi_{\mathbf{k}\lambda}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \eta_\lambda$

Donde: estados de espín up y down en z: $\eta_\uparrow = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}$ $\eta_\downarrow = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix}$
(autoestados de S_z)

Operadores de partícula única

$$\hat{a}_{\mathbf{k}\lambda}^\dagger \xrightarrow{\text{crea una partícula en}} \left\{ \begin{array}{l} \phi_{\mathbf{k}\lambda}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \eta_\lambda \\ |\mathbf{k}\lambda\rangle \end{array} \right.$$

Operador de energía cinética

Operador de energía cinética para una partícula: $\hat{t} = \frac{p^2}{2m} = -\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m}$

Aplicamos la fórmula general: $\hat{T} = \sum_{i,j=1}^{\infty} \langle i|\hat{t}|j\rangle \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j$

Usando la base de partícula única: $\phi_{\mathbf{k}\lambda}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \eta_\lambda$

$$i = \mathbf{k}_1 \lambda_1, j = \mathbf{k}_2 \lambda_2$$



$$\hat{T} = \sum_{\mathbf{k}_1 \lambda_1, \mathbf{k}_2 \lambda_2} \langle \mathbf{k}_1 \lambda_1 | \hat{t} | \mathbf{k}_2 \lambda_2 \rangle \hat{a}_{\mathbf{k}_1 \lambda_1}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{k}_2 \lambda_2}$$

Operador de energía cinética

$$\hat{T} = \sum_{\mathbf{k}_1 \lambda_1, \mathbf{k}_2 \lambda_2} \langle \mathbf{k}_1 \lambda_1 | \hat{t} | \mathbf{k}_2 \lambda_2 \rangle \hat{a}_{\mathbf{k}_1 \lambda_1}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{k}_2 \lambda_2}$$

Trabajamos el elemento de matriz de una partícula:

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{k}_1 \lambda_1 | t | \mathbf{k}_2 \lambda_2 \rangle &= (2mV)^{-1} \int d^3x e^{-i\mathbf{k}_1 \cdot \mathbf{x}} \eta_{\lambda_1}^\dagger (-\hbar^2 \nabla^2) e^{i\mathbf{k}_2 \cdot \mathbf{x}} \eta_{\lambda_2} \\ &= \frac{\hbar^2 k_2^2}{2mV} \delta_{\lambda_1 \lambda_2} \int d^3x e^{i(\mathbf{k}_2 - \mathbf{k}_1) \cdot \mathbf{x}} \\ &= \frac{\hbar^2 k_2^2}{2m} \delta_{\lambda_1 \lambda_2} \delta_{\mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2} \end{aligned}$$

$$\int d^3x e^{i(\mathbf{k}_2 - \mathbf{k}_1) \cdot \mathbf{x}} = V \delta_{\mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2}$$


$$\hat{T} = \sum_{\mathbf{k} \lambda} \frac{\hbar^2 k^2}{2m} a_{\mathbf{k} \lambda}^\dagger a_{\mathbf{k} \lambda}$$

Operador de energía cinética

$$\hat{T} = \sum_{\mathbf{k}_1 \lambda_1, \mathbf{k}_2 \lambda_2} \langle \mathbf{k}_1 \lambda_1 | \hat{t} | \mathbf{k}_2 \lambda_2 \rangle \hat{a}_{\mathbf{k}_1 \lambda_1}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{k}_2 \lambda_2}$$



$$\hat{T} = \sum_{\mathbf{k}\lambda} \frac{\hbar^2 k^2}{2m} a_{\mathbf{k}\lambda}^\dagger a_{\mathbf{k}\lambda} = \sum_{\mathbf{k}\lambda} \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \hat{n}_{\mathbf{k}\lambda}$$

Operadores de dos partículas: interacciones

Sistemas con invariancia translacional

Operadores en segunda cuantización

for local two-particle operators

$$\hat{V} = \frac{1}{2} \sum_{\substack{i,j=1 \\ i \neq j}}^N \hat{v}(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j) = \frac{1}{2} \sum_{ijkl=1}^{\infty} \langle ij | \hat{v} | kl \rangle \hat{c}_i^\dagger \hat{c}_j^\dagger \hat{c}_\ell \hat{c}_k$$

Elemento de matriz de dos partículas:

$$\langle ij | \hat{v} | kl \rangle = \int \int \phi_i^*(\mathbf{x}) \phi_j^*(\mathbf{x}') v(\mathbf{x}, \mathbf{x}') \phi_k(\mathbf{x}) \phi_\ell(\mathbf{x}') d\mathbf{x} d\mathbf{x}'$$

Antes de tratar la interacción Coulombiana en el gas de electrones repasamos los ingredientes de sistemas con invariancia translacional.

Sistemas con invariancia translacional

Chapter 5

Example: the Hamiltonian of
translationally invariant
systems in second quantization

(Gross-Runge-Heinonen)

$$\left\{ \begin{array}{l} u(\mathbf{r}) = u = \text{constant} \\ v(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = v(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \end{array} \right.$$

Suponemos volumen: $\Omega = L^3$

Al final del cálculo tomamos el límite

$$\left\{ \begin{array}{l} N \rightarrow \infty, \Omega \rightarrow \infty \\ N/\Omega \text{ constante} \end{array} \right.$$

Sistemas con invariancia translacional

De nuevo: $\phi_{\mathbf{k}\sigma}(\mathbf{x}) = \frac{1}{\sqrt{\Omega}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \chi_{\sigma}(s)$.

$$\chi_{+} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \chi_{-} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

$$x = (\mathbf{r}, s) \quad \int dx = \sum_s \int d^3r$$

$$\chi_{+}(s) = \begin{cases} 1 & \text{for } s = +1/2 \\ 0 & \text{for } s = -1/2 \end{cases}$$

$$\chi_{-}(s) = \begin{cases} 0 & \text{for } s = +1/2 \\ 1 & \text{for } s = -1/2. \end{cases}$$

Ortonormalidad:

$$\int_{\Omega} \phi_{\mathbf{k}'\sigma'}^*(\mathbf{x}) \phi_{\mathbf{k}\sigma}(\mathbf{x}) d\mathbf{x} = \frac{1}{\Omega} \int_{\Omega} e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\cdot\mathbf{r}} d^3r \sum_s \chi_{\sigma}^*(s) \chi_{\sigma'}(s) = \delta_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} \delta_{\sigma,\sigma'}$$

Resumen de la clase 10

Operadores de partícula única en segunda cuantización

Operador de energía cinética: forma diagonal

Operadores de dos partículas: interacciones

Sistemas con invariancia translacional