

**La clase pasada vimos:**

Autoestado y autoenergías en sistemas cuasi-2D

Ocupación de subbandas

Sistemas cuasi-1D

**Esta clase veremos:**

Introducción a segunda cuantización para fermiones:

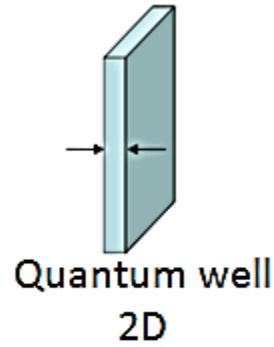
Estados de  $N$  fermiones

Representación de número de ocupación

Operadores de destrucción y creación

Operadores de una y dos partículas

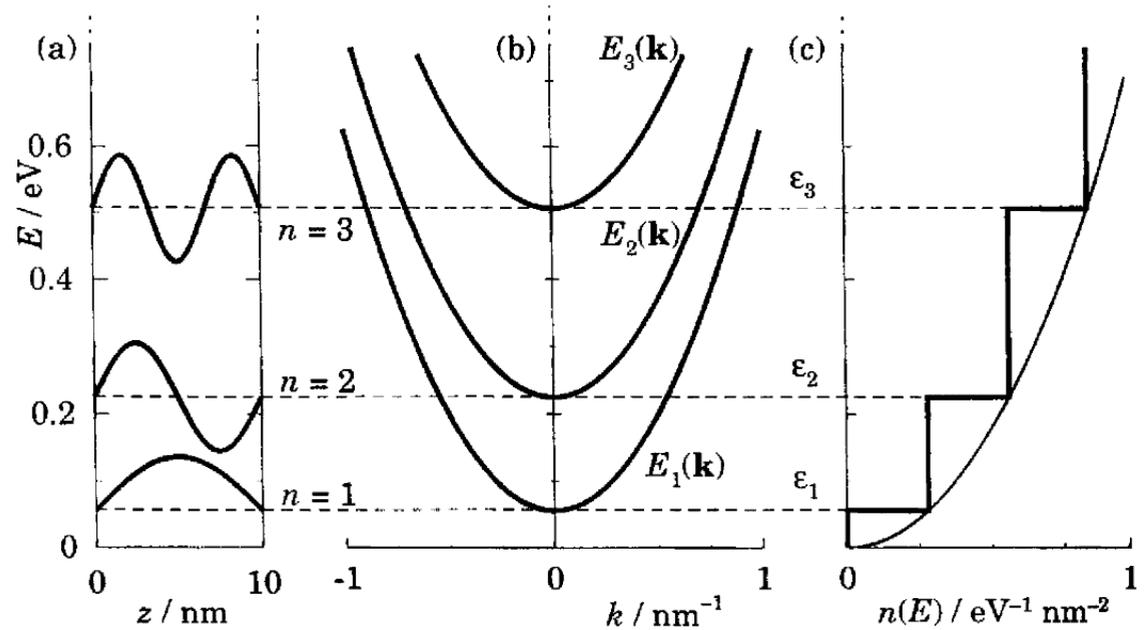
# Pozos cuánticos: Hamiltoniano separable cuasi-2D



$$\mathbf{r} = (x, y) \quad \mathbf{k} = (k_x, k_y)$$

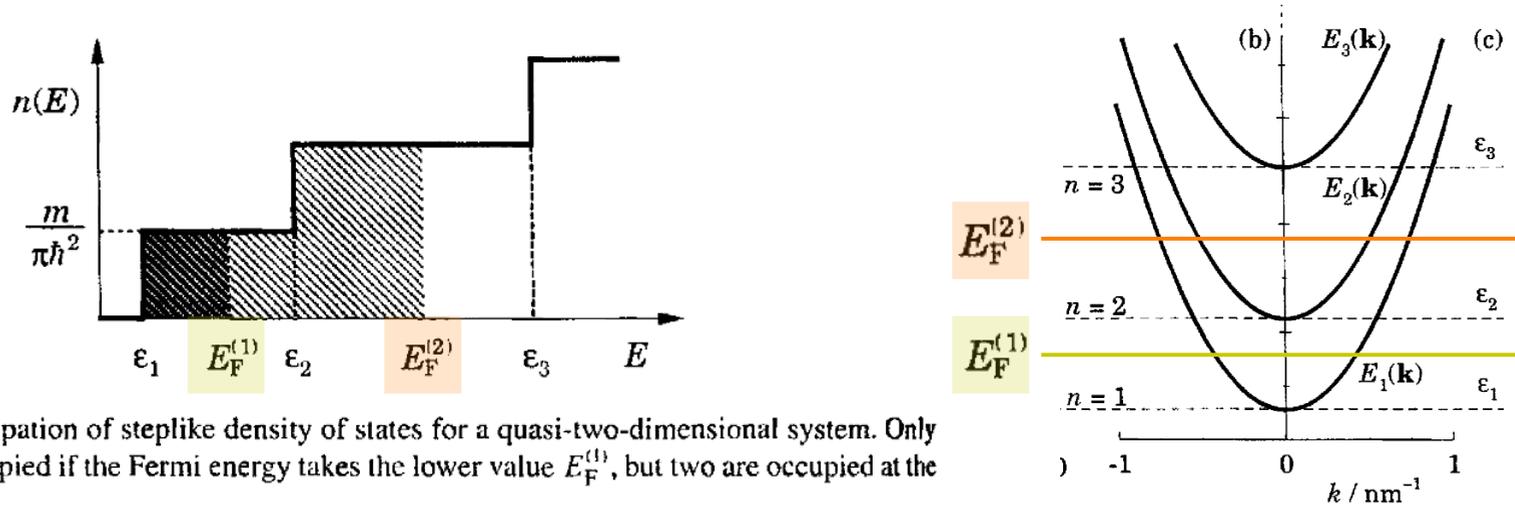
$$\left\{ \begin{array}{l} \psi_{\mathbf{k},n}(\mathbf{r}, z) = \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}) u_n(z) \\ E_n(\mathbf{k}) = \varepsilon_n + \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m} \end{array} \right.$$

REPASO



**FIGURE 4.7.** (a) Potential well with energy levels, (b) total energy including the transverse kinetic energy for each subband, and (c) steplike density of states of a quasi-two-dimensional system. The example is an infinitely deep square well in GaAs of width 10 nm. The thin curve in (c) is the parabolic density of states for unconfined three-dimensional electrons.

# Pozos cuánticos: ocupación de subbandas



**FIGURE 4.8.** Occupation of steplike density of states for a quasi-two-dimensional system. Only one subband is occupied if the Fermi energy takes the lower value  $E_F^{(1)}$ , but two are occupied at the higher value  $E_F^{(2)}$ .

$$n_j = \frac{m}{\pi \hbar^2} \int_{\epsilon_j}^{\infty} f(E, E_F) dE = \frac{mk_B T}{\pi \hbar^2} \ln \left[ 1 + \exp \left( \frac{E_F - \epsilon_j}{k_B T} \right) \right]$$

$$n_{2D} = \int_{-\infty}^{\infty} n(E) f(E, E_F) dE$$

$$n_{2D} = \sum_j n_j$$

Límite de  $T = 0$

$$n_{2D} = \sum_j n_j = \frac{m}{\pi \hbar^2} \sum_j (E_F - \epsilon_j) \Theta(E_F - \epsilon_j)$$

# Cables cuánticos: Hamiltoniano separable cuasi-1D

$$\mathbf{r} = (x, y)$$

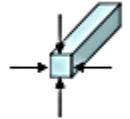
$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) + V(\mathbf{r}) \right] u_{m,n}(\mathbf{r}) = \varepsilon_{m,n} u_{m,n}(\mathbf{r})$$

$$\psi_{m,n,k_z}(\mathbf{R}) = u_{m,n}(\mathbf{r}) \exp(ik_z z),$$

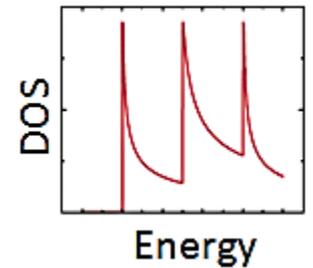
$$E_{m,n}(k_z) = \varepsilon_{m,n} + \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m}.$$

$$n(E) = \sum_{m,n} \frac{1}{\pi \hbar} \sqrt{\frac{2m}{E - \varepsilon_{m,n}}} \Theta(E - \varepsilon_{m,n})$$

Densidad de estados  
(por unidad de longitud)



Quantum wire  
1D



Estados de  $N$  fermiones

## Estados de N fermiones

$$\text{Átomo de hidrógeno} \left\{ \begin{array}{l} \langle \mathbf{r} | \varphi_{n,l,m} \rangle = \varphi_{n,l,m}(r, \theta, \varphi) = R_{n,l} Y_l^m(\theta, \varphi) \\ E_n = -\frac{E_R}{n^2} = -\frac{13.6 \text{ eV}}{n^2} \end{array} \right.$$

En primera aproximación, para describir un átomo de N electrones, llenamos los orbitales atómicos respetando el principio de exclusión de Pauli, considerando también el grado de libertad de espín.

(Las energías se multiplican por N, el número de protones en el núcleo.)

## Estados de N fermiones

Si ordenamos los orbitales en energías crecientes, el *estado fundamental* de los N electrones es el determinante de Slater:

$$|\Phi_{1,2,\dots,N}^{(A)}\rangle = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} |1:\varphi_1\rangle & |1:\varphi_2\rangle & \dots & |1:\varphi_N\rangle \\ |2:\varphi_1\rangle & |2:\varphi_2\rangle & \dots & |2:\varphi_N\rangle \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ |N:\varphi_1\rangle & |N:\varphi_2\rangle & \dots & |N:\varphi_N\rangle \end{vmatrix}$$

$$E_{\text{total}} = E_1 + E_2 + \dots + E_N$$

energía de Fermi

## Estados de N fermiones

Podemos elegir arbitrariamente los orbitales ocupados con electrones y así obtenemos otros determinantes de Slater. Ocupamos N orbitales dados por:

$$c = (c_1, c_2, \dots, c_N)$$

$$c_i \in \mathcal{N}$$
$$c_1 < c_2 < \dots < c_N$$

$$\langle \mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N | c \rangle = \Phi_c(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N)$$

Ejemplo:

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

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

## Estados de N fermiones

Los determinantes de Slater:  $\langle \mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N | c \rangle = \Phi_c(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N)$   
 $c = (c_1, c_2, \dots, c_N)$

Forman una **base del espacio de Hilbert de kets antisimétricos** frente al Intercambio de fermiones.

Con ellos se puede expandir cualquier estado de N electrones:

$$\Psi(x_1, \dots, x_N) = \sum_c a_c \Phi_c(x_1, \dots, x_N)$$

Los químicos llaman esta forma de escribir el estado: CI (configuration interaction)

## Representación de números de ocupación

Dijimos:  $|c\rangle = |c_1, c_2, \dots, c_N\rangle$

Podemos expresar lo mismo en la representación de *números de ocupación*:

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

¿Cuántos números hay?

Ejemplo:

Supongamos que  $\phi_1, \phi_3$  and  $\phi_4$  are occupied, so  $c = (1, 3, 4)$

$$\longrightarrow |1, 3, 4\rangle = |1_1, 0_2, 1_3, 1_4, 0_5, 0_6, \dots\rangle$$

Operadores de destrucción y creación de fermiones

## Operadores de destrucción y creación de fermiones

Definimos el **operador de destrucción** por su acción en un determinante de Slater:

$$\hat{c}_k | n_1, \dots, n_k, \dots \rangle = \theta_k n_k | n_1, \dots, 0_k, \dots \rangle$$



$n_k$  puede ser 0 o 1

Notar que agregamos un *signo* en la definición del operador de destrucción:

$$\theta_k \equiv (-1)^{\left[ \sum_{j < k} n_j \right]}$$

## Operadores de destrucción y creación de fermiones

Definimos el **operador de creación** análogamente:

$$\hat{c}_k^\dagger |n_1, \dots, 0_k, \dots\rangle = \theta_k |n_1, \dots, 1_k, \dots\rangle$$

$$\hat{c}_k^\dagger |n_1, \dots, 1_k, \dots\rangle = 0$$

$$\longrightarrow \hat{c}_k^\dagger |n_1, \dots, n_k, \dots\rangle = \theta_k(1 - n_k) |n_1, \dots, 1_k, \dots\rangle$$

Aplicando N operadores de creación al “vacío” podemos generar cualquier determinante de Slater:

$$|c_1, c_2, \dots, c_N\rangle = \hat{c}_{c_1}^\dagger \hat{c}_{c_2}^\dagger \dots \hat{c}_{c_N}^\dagger |0\rangle = \prod_{k=1}^{\infty} (\hat{c}_k^\dagger)^{n_k} |0\rangle$$

vacío

## Operadores de destrucción y creación de fermiones

Se pueden demostrar las siguientes reglas de **anticonmutación**:

$$\{\hat{c}_\ell, \hat{c}_k\} = 0$$

$$\{\hat{c}_\ell^\dagger, \hat{c}_k^\dagger\} = 0$$

$$\{\hat{c}_\ell^\dagger, \hat{c}_k\} = \delta_{\ell,k}$$

## Operadores de destrucción y creación de fermiones

Analicemos la siguiente combinación de operadores:

$$\begin{aligned}\hat{c}_k^\dagger \hat{c}_k |n_1, \dots, n_k, \dots\rangle &= \hat{c}_k^\dagger \theta_k n_k |n_1, \dots, 0_k, \dots\rangle \\ &= \theta_k \theta_k n_k (1 - 0) |n_1, \dots, 1_k, \dots\rangle \\ &= n_k |n_1, \dots, 1_k, \dots\rangle.\end{aligned}$$

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

Y el 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 de una y dos partículas

## Operadores de una y dos partículas

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

# Resumen de la clase 9

Estados de  $N$  fermiones

Representación de número de ocupación

Operadores de destrucción y creación

Operadores de una y dos partículas