Estructura de la materia 3
Serie 3 - Segunda Cuantificación
Cátedra: Martín Ruiz de Azúa
2do Cuatrimestre de 2005

Formalismo de Segunda Cuantificación

1. Si la función ϕ está representada por Φ^4_{1234} , es decir

$$\Phi = \frac{1}{(4!)^{1/2}} \sum_p (-1)^p P\phi_1(x_1)\phi_2(x_2)\phi_3(x_3)\phi_4(x_4),$$

Verifique que ,

a) $a_3\Phi = \Phi^3_{124}$

b) $a_2\Phi = -\Phi^3_{134}$

c) $a^\dagger_3\Phi = 0$

d) $a_5\Phi = 0$

e) $a^\dagger_5\Phi = \Phi^5_{12345}$

f) $a^\dagger_3 a_3\Phi = \Phi$

g) $(a_2 a_4 + a_4 a_2)\Phi = 0$

h) $(a_1 a^\dagger_5 + a^\dagger_5 a_1)\Phi = 0$

i) $a_3 a_2 a_1\Phi = \Phi^1_4 = \phi_4(x_1)$

2. Halle los conmutadores $[a^\dagger_k a_l , a_m]$ y $[a^\dagger_k a_l , a^\dagger_m]$

3. Muestre que el operador ,

$$\hat{N} = \int \hat{\Psi}^+(x)\hat{\Psi}(x)dx$$

representa el número total de partículas,
y que $\hat{N} = \sum_k \hat{n}_k$, donde $\hat{n}_k = a^\dagger_k a_k$ es el operador número de ocupación del espín-orbital *k*.
Ayuda:

$$\hat{\Psi}(x) = \sum_i \phi_i(x)\hat{a}_i$$

$$\hat{\Psi}^+(x) = \sum_i \phi_i(x)\hat{a}^+{}_i$$

4. Demuestre que:

$$\hat{N}\hat{\Psi}(x) = \hat{\Psi}(x)(\hat{N}-1)$$

Usando este resultado muestre que el operador a_k elimina al electrón del espín-orbital k de $|\Psi\rangle$**,** dando lugar a un estado de N-1 partículas. ¿Qué sucede si se aplica $a^{\dagger}_k$?

5. Sean $\hat{h}$ y $\hat{U}$ los operadores de una y dos partículas del hamiltoniano $\hat{H}$ respectivamente. Pruebe que:

$$[\hat{h},\hat{N}]=0$$
$$[\hat{U},\hat{N}]=0$$

Por lo tanto los autoestados del hamiltoniano $\hat{H}$ tienen el número de partículas bien definido.

6. Pruebe que

$$\sum_k a_k^+[\hat{h},a_k] = -\hat{h} \qquad \text{y} \qquad \sum_k a_k^+[\hat{U},a_k] = -2\hat{U}$$

y por lo tanto que la energía < H > = < $\hat{h}$ > + < $\hat{U}$ > de un estado $|\Psi\rangle$ está dada por

$$\frac{1}{2}\langle\Psi|\hat{h}|\Psi\rangle - \frac{1}{2}\sum_k \langle\Psi|\ a_k^+[\hat{H},a_k]\ |\Psi\rangle$$

7. En base a las siguientes definiciones de operadores $\hat{f}$ de un cuerpo y $\hat{U}$ de dos cuerpos:

$$\hat{f} = \int \hat{\Psi}^+(x) f(x) \hat{\Psi}(x) dx$$
$$\hat{U} = \frac{1}{2}\int\int \hat{\Psi}^+(x_1)\hat{\Psi}^+(x_2) U(x_1,x_2) \hat{\Psi}(x_2)\Psi(x_1) dx_1 dx_2$$

demuestre que

$$\hat{f} = \sum_{i,j} \langle \phi_i \,|\, f(1) \big| \phi_j \rangle a_i^\dagger a_j \qquad con \quad \langle \phi_i \,|\, f(1) \big| \phi_j \rangle = \int \phi_i^*(x) f(x) \phi_j(x) dx$$

$$\hat{U} = \frac{1}{2} \sum_{i,j,k,l} \langle \phi_i \phi_j \, \big| U(1,2) \big| \phi_k \phi_l \rangle a_i^\dagger a_j^\dagger a_l a_k$$

$$con \quad \langle \phi_i \phi_j \, \big| U(1,2) \big| \phi_k \phi_l \rangle = \int\int \phi_i^*(x_1) \phi_j^*(x_2) U(x_1, x_2) \phi_k(x_1) \phi_l(x_2) dx_1 dx_2$$

Verifique que si se toma $|\Psi\rangle$ **y** $|\Psi'\rangle$ dos estados de partícula independiente, entonces:

$$\langle \Psi | \hat{f} | \Psi \rangle = \sum_i \langle \phi_i \,|\, f(1) \big| \phi_i \rangle$$

$$\langle \Psi | \hat{f} | \Psi' \rangle = \langle \phi_i \,|\, f(1) \big| \phi_j \rangle \quad si\ difieren\ en\ un\ espín - orbital$$

es decir que se recuperan los resultados, ya conocidos, que se obtienen con el formalismo convencional.

Encuentre las expresiones correspondientes para el operador $\hat{U}$.