Magnetismo Cuántico y Electrones Correlacionados

LECTURE 0
Segunda Cuantización

1.1. Estados de Fock

Supongamos que $\{|\phi_i\rangle\}_{i=1}^{N}$ forman una base ortonormal de estados de una partícula:

$$\langle\phi_i|\phi_j\rangle = \delta_{ij}. \tag{1.1}$$

Definimos $a_i^\dagger$ como el operador de creación del estado i y a su hermíco conjugado, a_i, como el operador de destrucción. Ambos estan definidos con respecto al estado vacío $|0\rangle_i$, de forma tal que:

$$|\phi_j\rangle = a_i^\dagger|0\rangle_i, \quad a_i|0\rangle_i = 0. \tag{1.2}$$

El operador de número de partículas en el orbital i se define como

$$n_i \equiv a_i^\dagger a_i. \tag{1.3}$$

El *espacio de Fock* se define como el espacio de Hilbert que contiene cualquier estado físico con numero arbitrario de partículas. Es preciso notar que tales estados son completamente simétricos (antisimétricos) para el caso de bosones (fermiones). Los llamados *estados de Fock* están etiquedados por los números de ocupación n_i,

$$|n_1, n_2, ...\rangle \equiv P^\eta \prod_{l=1}^{n_1} \phi_1(\mathbf{r}_l) \prod_{l=n_1+1}^{n_1+n_2} \phi_2(\mathbf{r}_l)... = \prod_i \frac{(a_i^\dagger)^{n_i}}{\sqrt{n_i!}}|0\rangle_i \tag{1.4}$$

y forman una base conveniente para generar el espacio de Fock. El operador P^η ($\eta = 1$ para bosones y $\eta = -1$ para fermiones) simetriza ($\eta = 1$) o antisimetriza ($\eta = -1$) la funcion que está a su derecha respecto de la permutación de cualquier par de coordenadas. La condición de simetría (antisimetría) de los estados de varios bosones (fermiones) se traduce en relaciones de conmutación (anticonmutación) que deben ser satisfechas for los correspondientes operadores de creación y destrucción:

$$\begin{aligned} \left[a_i, a_j^\dagger\right]_\eta &= a_i a_j^\dagger - \eta a_j^\dagger a_i = \delta_{ij}, \\ \left[a_i, a_j\right]_\eta &= 0. \end{aligned} \tag{1.5}$$

Queda como ejercicio para el lector deducir estas relaciones de conmutación (anticonmutación) a partir de las ecuaciones (1.3) y (1.4). El número total de partículas, N, es simplemente la suma de los n_i:

$$N = \sum_i n_i. \tag{1.6}$$

Las relaciones de conmutación (anticonmutación) definen el *álgebra* de los operadores de segunda cuantización. Esta álgebra es invariante ante transformacione canónicas. En particular, dejamos como ejercicio verificar que una tranformación unitaria de la base de estados una partícula:

$$a_\alpha^\dagger = \sum_i U_{\alpha i} a_i^\dagger, \quad U^\dagger U = I, \tag{1.7}$$

deja las relaciones de conmutación (1.5) inalteradas.

1.2. Operadores Bilineales

Supngamos que $\hat{\mathbf{A}}$ es un operador bilineal en los operadores de creación y destrucción. En tal caso, $\hat{\mathbf{A}}$ tiene una matriz asociada de elementos A_{ij} de forma tal que:

$$\hat{\mathbf{A}} = \sum_{ij} a_i^\dagger A_{ij} a_j \equiv \mathbf{a}^\dagger \cdot A \cdot \mathbf{a}\,. \tag{1.8}$$

En lo que sigue supondremos que A es una matriz hermítica y definida en la base de estados $|\phi_i\rangle$, es decir, un operador de un partícula.

Las relaciones de conmutación de *operadores bilineales* con *operadores lineales* son particularmente simples. Todo operador lineal $\hat{\mathbf{v}}^\dagger$ tiene asociado un vector $\mathbf{v}$ de componentes v_i de modo tal que:

$$\hat{\mathbf{v}}^\dagger = \sum_i v_i a_i^\dagger = \mathbf{v} \cdot \mathbf{a}^\dagger. \tag{1.9}$$

Dejamos como ejercicio demostrar que

$$\left[\hat{\mathbf{A}}, \hat{\mathbf{v}}^\dagger\right] = (A\mathbf{v}) \cdot \mathbf{a}^\dagger. \tag{1.10}$$

Si $\mathbf{v}$ es un autovector de A con autovalor v, diremos que $\hat{\mathbf{v}}^\dagger$ es un autoperador de $\left[\hat{\mathbf{A}},\right]$ con autovalor v. Este resultado es útil para rotar el operador $\hat{\mathbf{v}}^\dagger$:

$$e^{i\theta\hat{\mathbf{A}}}\hat{\mathbf{v}}^\dagger e^{-i\theta\hat{\mathbf{A}}} = \hat{\mathbf{v}}^\dagger + i\theta\left[\hat{\mathbf{A}},\hat{\mathbf{v}}^\dagger\right] + \frac{(i\theta)^2}{2}\left[\hat{\mathbf{A}},\left[\hat{\mathbf{A}},\hat{\mathbf{v}}^\dagger\right]\right] + ... = e^{iv\theta}\hat{\mathbf{v}}^\dagger. \tag{1.11}$$

Toda matriz untaria se puede escribir en términos de un conjunto de generadores hermíticos A_α y parámetros θ_α:

$$U_\theta = e^{i\sum_\alpha \theta_\alpha A_\alpha}. \tag{1.12}$$

La versión de este operador en el espacio de Fock (espacio de estados de varias partículas) se define como:

$$\hat{\mathbf{U}}_\theta = e^{i\sum_\alpha \theta_\alpha \hat{\mathbf{A}}_\alpha}. \tag{1.13}$$

Usando la relación (1.11) dejamos como ejercicio verificar que $\hat{\mathbf{v}}^\dagger$ transforma bajo $\hat{\mathbf{U}}_\theta$ de la siguiente forma:

$$\hat{\mathbf{U}}_\theta\hat{\mathbf{v}}^\dagger\hat{\mathbf{U}}_\theta^{-1} = (U_\theta \cdot \mathbf{v}) \cdot \mathbf{a}^\dagger. \tag{1.14}$$

Demostrar también que la relación de conmutación entre dos operadores bilineales esta dada por:

$$\left[\hat{\mathbf{A}},\hat{\mathbf{B}}\right] = \mathbf{a}^\dagger \cdot [A,B] \cdot \mathbf{a}\,. \tag{1.15}$$

tanto para bosones como para fermiones.

subsectionEjemplo: Algebra de Espín

Las componentes del operador de espín son ejemplos de operadores bilineales:

$$S^\alpha = \frac{1}{2}\sum_{ss'=1}^{2} a_s^\dagger \sigma_{ss'}^\alpha a_{s'}, \tag{1.16}$$

con $\alpha = x, y, z$ y

$$\sigma^x = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}, \quad \sigma^y = \begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix}, \quad \sigma^z = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}.$$

Dejamos como ejercicio final de esta sección verificar que las componentes del espín satisfacen las relaciones de conmutación de las componentes del momento angular:

$$[S^\mu, S^\nu] = i\epsilon^{\mu\nu\gamma}S^\gamma, \tag{1.17}$$

donde $\epsilon^{\mu\nu\gamma}$ son las componentes del tensor totalmente antisimḿtrico o tensor de Levi-Civita.

1.3. Hamiltonianos sin Interacciones

Los Hamiltonianos cuadráticos más simples son de la forma

$$H = \sum_{jj'} a_j^\dagger (H_{jj'} - \mu I) a_{j'} = \sum_k (\epsilon_k - \mu) b_k^\dagger b_k, \tag{1.18}$$

donde I es la matriz identidad, H es una matriz hermítica, ϵ_k son sus autovalores, $\mathbf{v}_k$ son sus autovectores y $b_k^\dagger = \mathbf{a}^\dagger \cdot \mathbf{v}_k$. La cantidad μ es el potencial químico que regula el numero promedio de partículas. Estos Hamiltonianos describen sistemas no interactivos. La función de partición asociada con H es:

$$Z = \mathrm{Tr} e^{-H/T} = \prod_k \sum_{n_k=0}^{n_{max}} e^{-\frac{(\epsilon_k-\mu)n_k}{T}} = \prod_k (1 - \eta e^{-\frac{(\epsilon_k-\mu)}{T}})^{-\eta},$$

donde $n_{max} \to \infty$ para bosones y $n_{max} = 1$ para el caso de fermiones. La energía libre que resulta de esta ecuación es:

$$F \equiv -T \ln Z = \eta T \sum_k \ln (1 - \eta e^{\frac{-(\epsilon_k-\mu)}{T}}). \tag{1.19}$$

Las probabilidades de ocupación de cada estado k es equilibrio termodinámico que resultan de F son:

$$\langle b_k^\dagger b_k \rangle = \frac{\partial F}{\partial \epsilon_k} = \frac{1}{Z} \mathrm{Tr} \left[b_k^\dagger b_k e^{-H/T} \right] = (e^{\frac{(\epsilon_k-\mu)}{T}} - \eta)^{-1}, \tag{1.20}$$

que son las funciones de Bose para $\eta = 1$ y de Fermi para $\eta = -1$.