Mecánica Cuántica II

Prof. Aníbal Iucci
JTP Alejo Costa

Práctica 4: Segunda cuantificación

Año 2024

1. *a*) Muestre que un operador de interacción de dos cuerpos $\sum_{i<j} V(\boldsymbol{r}_i, \boldsymbol{r}_j)$ independiente del spin puede escribirse como

$$V = \frac{1}{2}\sum_{s,s'} \int d^3r d^3r' \psi^\dagger(\boldsymbol{r}, s)\psi^\dagger(\boldsymbol{r'}, s')V(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r'})\psi(\boldsymbol{r'}, s')\psi(\boldsymbol{r}, s) \tag{1}$$

   b) Escriba los operadores de energía cinética e impulso de un sistema de partículas en términos de los operadores de creación y aniquilación de estados de impulso definido. Haga lo mismo con un operador de dos cuerpos $\sum_{i<j} V(|\boldsymbol{r}_i - \boldsymbol{r}_j|)$.

   c) A partir del desarrollo del operador de un cuerpo $F = \sum_{i,j} \langle i| F |j\rangle a_i^\dagger a_j$ y de uno de dos cuerpos $V = \frac{1}{2}\sum_{ijkl} \langle ij| V |kl\rangle a_i^\dagger a_j^\dagger a_k a_l$, muestre que

$$\langle n_1, n_2, ... |F| n_1, n_2, ...\rangle = \sum_i n_i \langle i |F| i\rangle \tag{2}$$

$$\langle n_1, n_2, ... |V| n_1, n_2, ...\rangle = \frac{1}{2}\sum_{i\neq j} n_i n_j \left(\langle ij |V| ij\rangle \pm \langle ij |V| ji\rangle\right) + \frac{1}{2}\sum_i n_i(n_i - 1) \langle ii |V| ii\rangle \tag{3}$$

   donde el signo $+$ corresponde a bosones y el $-$ a fermiones y n_i denota el número de ocupación del estado $|i\rangle$.

2. Sean $a_i^\dagger$, a_i un conjunto de operadores de creación y destrucción.

   a) Muestre que los operadores

$$b_i = \textstyle\sum_j D_{ij}^* a_j, \quad b_i^\dagger = \sum_j D_{ij} a_j^\dagger, \tag{4}$$

   satisfacen las correspondientes reglas de conmutación o anticonmutación si la matriz de coeficientes D_{ij} es unitaria.

   b) ¿Cómo utilizaría dicha transformación para diagonalizar un hamiltoniano bilinear? Estos hamiltonianos tienen la forma

$$H = \sum_{i,j} a_i^\dagger h_{ij} a_j \tag{5}$$

   donde h es una matriz hermítica.

   c) Exprese el operador de creación de estados de impulso definido $a^\dagger(\boldsymbol{p})$ en términos de los operadores de campo $a^\dagger(\boldsymbol{r})$. Verifique que se cumple la propiedad anterior extendida al caso continuo.

   d) Muestre que los operadores

$$c_j = a_j^\dagger \quad c_j^\dagger = a_j \tag{6}$$

   satisfacen en el caso fermiónico las mismas reglas de anticonmutación que los a_i y entonces pueden considerarse como operadores de creación y destrucción fermiónicos. ¿Sucede lo mismo para bosones?

3. **Gas de bosones interactuantes**

   a) Considere un sistema de bosones interactuantes cuyo Hamiltoniano es de la forma

$$H = \sum_{\alpha=1}^{N}\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla_\alpha^2 + \frac{1}{2}\sum_{\beta=1}^{N} V(|\boldsymbol{r}_\alpha - \boldsymbol{r}_\beta|)\right]$$

   donde $V(|\boldsymbol{r}_\alpha - \boldsymbol{r}_\beta|)$ es un potencial de interacción entre dos partículas y depende solo de la distancia entre ellas. Muestre que, eligiendo las funciones de onda de una partícula como autofunciones del momento con autovalor $\boldsymbol{p}$, es decir

$$\psi_{\boldsymbol{p}}(\boldsymbol{r}) = L^{-3/2} e^{\frac{i}{\hbar}\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r}}$$

normalizadas en un cubo de lado L, el hamiltoniano puede ser escrito en segunda cuantización como

$$H = \sum_k \frac{p^2}{2m} a^\dagger_{\boldsymbol{p}_k} a_{\boldsymbol{p}_k} + \frac{1}{2} \sum \frac{1}{L^3} v(\boldsymbol{p}_l - \boldsymbol{p}_i) a^\dagger_{\boldsymbol{p}} a^\dagger_{\boldsymbol{p}_m} a_{\boldsymbol{p}_i} a_{\boldsymbol{p}_k}$$

donde la ultima suma esta sujeta a la conservación de momento $\boldsymbol{p}_l + \boldsymbol{p}_m = \boldsymbol{p}_i + \boldsymbol{p}_k$ y $v(\boldsymbol{p}) = \int V(|\boldsymbol{q}|) e^{-i\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{q}} d^3q$

4. Considere el hamiltoniano de *tight binding* en una dimensión, el cual se utiliza para modelar el movimiento electrónico en un sólido cristalino mediante saltos de un átomo a otro:

$$H_0 = \sum_{j=1}^{L} \epsilon c^\dagger_j c_j - t \left(c^\dagger_j c_{j+1} + c^\dagger_{j+1} c_j \right) \tag{7}$$

Estamos modelando un sólido con condiciones de contorno periódicas, lo cual implica identificar $C_1 = C_{L+1}$, y t es la llamada constante de hopping.

a) Muestre que puede diagonalizar por medio de una transformada de Fourier.

b) Llame $d(k)$ a los operadores obtenidos en el inciso anterior. Definiendo el estado de vacío $|0\rangle$ como aquel que cumple $d_(k) |0\rangle = 0\ \forall k$, muestre que todos los estados de la forma

$$|k_1, k_2, ...k_n\rangle = d^\dagger(k_1)...d^\dagger(k_n) |0\rangle \tag{8}$$

son autoestados del hamiltoniano. ¿Cuál es su energía?

c) Considere los operadores en el esquema de Heisenberg. Calcule la función de dos puntos retardada

$$G(k,t) = \frac{1}{i\hbar} \theta(t) \left\langle \left\{ d_k(t), d^\dagger_k(0) \right\} \right\rangle \tag{9}$$

y su transformada de Fourier, siendo $\theta(t)$ la función de Heaviside. Obtenga explicitamente la parte imaginaria de la función de dos puntos.

5. **Emisión espontánea**

a) Un electrón de un átomo de hidrógeno se encuentra en el estado $(n, l, m) = (2, 1, 1)$. Calcule la probabilidad de transición por unidad de tiempo al estado fundamental a través de un proceso de emisión espontánea. Discuta cuál es la distribución de impulsos y polarización del fotón emitido.

b) Calcule el tiempo de vida medio τ del estado $2p$ con $m = 0$ del átomo de hidrógeno con respecto a su decaimiento a estado $1s$.

c) Muestre que el estado $2s$ del atómo de hidrógeno no puede decaer a través de la interacción $\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{A}$ al estado $1s$ emitiendo un fotón, es decir

$$\langle 2s| \epsilon_{\boldsymbol{k}\sigma} \cdot \boldsymbol{p} e^{-i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}} |1s\rangle = 0$$

6. **Cadenas de Kitaev y modos de Majorana** Considere el Hamiltoniano de tight-binding con acoplamiento superconductor (p-wave) conocido como cadena de Kitaev de la forma.

$$H = -\mu \sum_i^N c^\dagger_i c_i + \frac{1}{2} \sum_i^{N-1} \left(t c^\dagger_i c_{i+1} + \Delta c_i c_{i+1} + \text{H.c} \right) \tag{10}$$

donde μ es el potencial químico , t es parámetro de hopping, Δ el acoplamiento superconductor y por H.c damos a entender que es necesario sumar el hermítico conjugado de los términos previos. Podemos definir el cambio de variable:

$$\begin{aligned} c_i &= \tfrac{1}{2} \left(\gamma_{B,i} + i\gamma_{A,i} \right) \\ c^\dagger_i &= \tfrac{1}{2} \left(\gamma_{B,i} - i\gamma_{A,i} \right) \end{aligned} \tag{11}$$

a) Mostrar que los operadores γ_α cumplen con la relacion de fermiones de majorana $\gamma^\dagger_{\alpha,i} = \gamma_{\alpha,i}$ y $\{\gamma_{\alpha,i}, \gamma_{\beta,j}\} = 2\delta_{\alpha\beta}\delta_{ij}$.

b) Mostrar que el Hamiltoniano en la nueva base de operadores de majorana es

$$H = -\mu \frac{1}{2} \sum_{i}^{N} (1 + i\gamma_{B,i}\gamma_{A,i}) - \frac{i}{4} \sum_{i}^{N-1} \left[(t + \Delta)\, \gamma_{B,i}\gamma_{A,i+1} + (t - \Delta)\, \gamma_{A,i}\gamma_{B,i+1} \right] \tag{12}$$

c) Estudiar los casos límites:

1) $\mu \leq 0, t = \Delta = 0$

2) $\mu = 0, t = \Delta \neq 0$, ¿Que pasa con los operadores $\gamma_{B,N}\gamma_{A,1}$?

d) Duplicando los grados de libertad del Hamiltoniano podemos escribir $\gamma_{B,i} = \gamma_{2i-1}$ y $\gamma_{A,i} = -\gamma_{2i}$. Resolver numéricamente para el límite $\mu = 0$, $t = \Delta \neq 0$, y graficar el espectro de energías del sistema y encontrar los modos del Majorana, Graficar el modulo $|\Psi_M|^2$ de los modos de Majorana.

e) Resolver numéricamente el Hamiltoniano obtenido en el literal d) y graficar la energía en función de μ/t , Analizar las diferentes fases topológicas del sistema.

7. **Tiempo de vida medio del estado fundamental del átomo de hidrógeno** La interacción magnética entre el spin del electrón y el del spin núcleo divide al estado fundamental del átomo de hidrógeno en dos: un estado con spin total 1 y otro con spin total 0. El fotón que es emitido de la transición entre estos estados tiene una longitud de onda de $\lambda \simeq 21cm$. Calcule el tiempo de vida medio τ de esta transición. Debería obtener $\tau \simeq 10^7$ años, tiempos no medibles en el laboratorio, sin embargo estas transiciones son bien conocidas en los estudios de radioastronomía.