

6 Segunda Cuantización

En física, un campo es un sistema con un número infinito, no contable, de grados de libertad, el cual está caracterizado por una amplitud de campo, la cual se comporta como un grado de libertad independiente en cada punto del espacio.

En este capítulo haremos una introducción a los campos cuánticos y estudiaremos la cuantización de la ecuación de Schrödinger, técnica conocida en la literatura como segunda cuantización. El método que se presenta es una de las varias herramientas que hay en la mecánica cuántica para tratar un sistema físico formado por muchas partículas idénticas y tiene como fundamento físico el considerar que la función de onda ψ , solución a la ecuación de Schrödinger, es un operador cuántico que me representa un campo de partículas en lugar de una partícula individual. La ecuación de ondas de Schrödinger se convierte entonces en la ecuación del campo clásico, la cual se debe de cuantizar de acuerdo con las reglas canónicas de cuantización en mecánica cuántica.

6.1 Cuadragésimo sexta lección

En esta lección introduciremos el formalismo canónico utilizado en la cuantización de los campos en mecánica cuántica, también conocido como formulación variacional de la mecánica cuántica (una de las nueve formulaciones de la teoría).

Comenzaremos por asumir que la función de onda ψ representa no un sistema físico individual, sino un campo clásico, caracterizado por un conjunto de partículas idénticas de masa m que no interactúan

entre sí, pero si lo pueden hacer con un campo externo a través de un potencial $V(\vec{r}, t)$. Asumiremos por hipótesis que el campo ψ satisface la ecuación de campo

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi + V(\vec{r}, t)\psi, \quad (6.1)$$

para hacer luego de ψ un operador cuántico del cual hallaremos su canónico conjugado, cuantizándolo luego de la manera canónica.

6.1.1 Formulación Lagrangiana clásica

En mecánica clásica un sistema físico está caracterizado por un Lagrangiano $L(q_i, \dot{q}_i; t)$ el cual es función de las coordenadas generalizadas del sistema (q_i) de sus derivadas temporales ($\dot{q}_i = dq_i/dt$) y del tiempo t . La trayectoria clásica del sistema físico para el movimiento desde el punto $q_i(t_1)$ en el tiempo t_1 hasta el punto $q_i(t_2)$ en el tiempo t_2 (para $i = 1, 2, \dots$ todos los grados de libertad del sistema físico) se obtiene al definir primero una acción clásica

$$S = \int_{t_1}^{t_2} dt L(q_i, \dot{q}_i; t),$$

y pedir luego que dicha acción sea estacionaria, es decir pedir que $\delta S = 0$ en un trayecto para el cual $\delta q_i(t_1) = \delta q_i(t_2) = 0$. De esta manera se tiene

$$\begin{aligned} \delta S &= \int_{t_1}^{t_2} dt \delta L(q_i, \dot{q}_i; t) = \int_{t_1}^{t_2} dt \left[\frac{\partial L}{\partial q_i} \delta q_i + \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \delta \dot{q}_i \right] \\ &= \int_{t_1}^{t_2} dt \left[\frac{\partial L}{\partial q_i} \delta q_i + \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \frac{d \delta q_i}{dt} \right] \\ &= \int_{t_1}^{t_2} dt \left[\frac{\partial L}{\partial q_i} \delta q_i + \frac{d}{dt} \left[\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \delta q_i \right] - \left[\frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \right] \delta q_i \right] \\ &= \int_{t_1}^{t_2} dt \left[\frac{\partial L}{\partial q_i} - \frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \right] \delta q_i + \left. \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \delta q_i \right]_{t_1}^{t_2} = 0. \end{aligned}$$

El último término es cero debido a la condición de frontera $\delta q_i(t_1) = \delta q_i(t_2) = 0$. Como la variación δq_i es arbitraria, la igualdad anterior es válida para cualquier δq_i solo si se cumple la ecuación

$$\frac{\partial L}{\partial q_i} - \frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} = 0, \quad i = 1, 2, 3, \dots, \quad (6.2)$$

conocida en la literatura como la ecuación de Euler-Lagrange, la cual no es más que la ecuación de movimiento del sistema físico, lo cual se puede ver al tomar la Lagrangiana del sistema como

$$L(q_i, \dot{q}_i; t) = \sum_i \left[\frac{1}{2} m \dot{q}_i^2 - V(q_i, t) \right],$$

donde $V(q_i, t)$ es la energía potencial del sistema físico. La aplicación de la ecuación (6.2) en el Lagrangiano anterior nos produce la ecuación

$$\frac{d}{dt} (m \dot{q}_i) = - \frac{\partial V(q_i, t)}{\partial q_i} \quad i = 1, 2, 3, \dots,$$

que no es más que la segunda ley de Newton, o ecuación de movimiento del sistema físico.

Se define a continuación $p_i \equiv \partial L / (\partial \dot{q}_i)$ como la variable canónica conjugada a q_i . El Hamiltoniano del sistema físico aparece entonces como la transformación de Legendre

$$H = \sum_i p_i \dot{q}_i - L = \sum_i \left[\frac{p_i^2}{2m} + V(q_i, t) \right],$$

y las ecuaciones de movimiento en su forma Hamiltoniana adquieren la forma:

$$\dot{q}_i = \frac{\partial H}{\partial p_i}, \quad \dot{p}_i = - \frac{\partial H}{\partial q_i}, \quad i = 1, 2, 3, \dots \quad (6.3)$$

6.1.2 Formulación Lagrangiana para campos

Por analogía con el caso clásico y refiriéndonos al campo descrito por la función de onda ψ , introduciremos la densidad Lagrangiana

$\mathcal{L}(\psi, \vec{\nabla}\psi, \dot{\psi}, t)$ la cual utilizaremos para definir la Lagrangiana del sistema físico mediante la expresión

$$L = \int d^3r \mathcal{L}(\psi, \vec{\nabla}\psi, \dot{\psi}, t). \quad (6.4)$$

La dependencia de $\vec{\nabla}\psi$ en el argumento de \mathcal{L} (la cual no está presente para el caso de partículas puntuales descrito en la sección anterior) es una consecuencia de la variación continua del campo ψ en la variable de posición \vec{r} . La acción clásica toma entonces la forma

$$S = \int_{t_1}^{t_2} dt L = \int_{t_1}^{t_2} dt \int d^3r \mathcal{L}(\psi, \vec{\nabla}\psi, \dot{\psi}, t) = \int d^4r \mathcal{L}(\psi, \vec{\nabla}\psi, \dot{\psi}, t);$$

pidiendo al igual que antes que la acción sea estacionaria en el intervalo entre t_1 y t_2 , con la condición de frontera $\delta\psi(t_1) = \delta\psi(t_2) = 0$, tenemos

$$\begin{aligned} \delta S &= \int d^4r \delta \mathcal{L} = \int d^4r \left[\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \psi} \delta \psi + \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\psi}} \delta \dot{\psi} + \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \vec{\nabla} \psi} \cdot \delta \vec{\nabla} \psi \right] \\ &= \int d^4r \left[\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \psi} \delta \psi + \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\psi}} \frac{d}{dt} \delta \psi + \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \vec{\nabla} \psi} \cdot \vec{\nabla} \delta \psi \right] \\ &= \int d^4r \left[\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \psi} \delta \psi + \frac{\partial}{\partial t} \left[\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\psi}} \delta \psi \right] + \vec{\nabla} \cdot \left[\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \vec{\nabla} \psi} \delta \psi \right] \right. \\ &\quad \left. - \left[\frac{\partial}{\partial t} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\psi}} \right] \delta \psi - \left[\vec{\nabla} \cdot \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \vec{\nabla} \psi} \right] \delta \psi \right] \\ &= \int d^4r \left[\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \psi} - \left[\frac{\partial}{\partial t} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\psi}} \right] - \left[\vec{\nabla} \cdot \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \vec{\nabla} \psi} \right] \right] \delta \psi; \end{aligned}$$

donde el segundo término del tercer renglón de la secuencia anterior es cero debido a que

$$\int d^4r \frac{\partial}{\partial t} \left[\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\psi}} \delta \psi \right] = \int d^3r \left. \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\psi}} \delta \psi \right]_{t_1}^{t_2},$$

ya que $\delta\psi(t_1) = \delta\psi(t_2) = 0$, y el tercer término también es cero, lo cual podemos ver haciendo uso del teorema de Gauss del cálculo integral, y

escribiéndolo como

$$\int d^4r \vec{\nabla} \cdot \left[\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \vec{\nabla} \psi} \delta \psi \right] = \int dt \oint d\vec{S} \cdot \left[\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \vec{\nabla} \psi} \delta \psi \right],$$

con la integral cerrada hecha sobre la superficie de una esfera de radio infinito (la densidad Lagrangiana es una integral sobre todo el espacio) donde los campos deben de anularse en el infinito, es decir:

$$\lim_{\vec{r} \rightarrow \infty} [\delta \psi(\vec{r})] = 0.$$

Como la acción debe ser estacionara para cualquier variación $\delta \psi$ de la función de onda ψ , entonces nuestra ecuación de Euler-Lagrange toma ahora la forma

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \psi} - \frac{\partial}{\partial t} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\psi}} - \vec{\nabla} \cdot \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \vec{\nabla} \psi} = 0, \quad (6.5)$$

la cual debe reproducir la ecuación de movimiento del sistema físico, o sea reproducir la ecuación de Schrödinger para la función de onda ψ .

Se trata ahora de desarrollar el siguiente programa:

- Hallar una densidad Lagrangiana \mathcal{L} la cual mediante el uso de la ecuación de Euler-Lagrange (6.5) me reproduzca la ecuación de Schrödinger o sea la ecuación del campo clásico.
- Hallar $\pi(\vec{r}, t)$ la variable canónico conjugada al campo $\psi(\vec{r}, t)$.
- Hallar la densidad Hamiltoniana del campo mediante una transformada de Legendre.

Procediendo de esta manera encontramos por inspección que nuestra densidad Lagrangiana la podemos tomar de la forma:

$$\mathcal{L} = i\hbar \psi^* \dot{\psi} - \frac{\hbar^2}{2m} \vec{\nabla} \psi^* \cdot \vec{\nabla} \psi - V(\vec{r}, t) \psi^* \psi; \quad (6.6)$$

la variable canónico conjugada a $\psi(\vec{r}, t)$ será entonces:

$$\pi(\vec{r}, t) = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\psi}} = i\hbar \psi^*(\vec{r}, t), \quad (6.7)$$

expresiones que nos sirven para hallar la densidad Hamiltoniana a través de la transformación de Legendre

$$\mathcal{H} = \pi\dot{\psi} - \mathcal{L} = -\frac{i\hbar}{2m}\vec{\nabla}\pi\cdot\vec{\nabla}\psi - \frac{i}{\hbar}V(\vec{r},t)\pi\psi = \frac{\hbar^2}{2m}\vec{\nabla}\psi^*\cdot\vec{\nabla}\psi + V\psi^*\psi; \quad (6.8)$$

de esta densidad Hamiltoniana podemos hallar el Hamiltoniano del sistema el cual toma la forma:

$$H = \int d^3r\mathcal{H} = \int d^3r\left[\frac{\hbar^2}{2m}\vec{\nabla}\psi^*\cdot\vec{\nabla}\psi + V\psi^*\psi\right] = \int d^3r\psi^*\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V\right]\psi, \quad (6.9)$$

donde la última forma del Hamiltoniano se obtuvo luego de integración por partes y de haber despreciado el término proporcional a

$$\int d^3r\vec{\nabla}\cdot(\psi^*\vec{\nabla}\psi) = \oint d\vec{s}\cdot(\psi^*\vec{\nabla}\psi).$$

Las ecuaciones de movimiento en su forma Hamiltoniana toman entonces la forma

$$\dot{\psi}(\vec{r},t) = \frac{\partial H(\psi, \dot{\psi}, \vec{\nabla}\psi; t)}{\partial \pi(\vec{r},t)}, \quad \dot{\pi}(\vec{r},t) = -\frac{\partial H(\psi, \dot{\psi}, \vec{\nabla}\psi; t)}{\partial \psi(\vec{r},t)} \quad (6.10)$$

En este punto es importante notar que, por ser ψ una función compleja, es equivalente a dos funciones reales y hay en nuestras ecuaciones dos grados de libertad independientes. Así pues, tanto ψ como $\psi^* = -i\pi/\hbar$ son independientes y existen en realidad dos ecuaciones de Euler-Lagrange. Una para ψ dada por la ecuación (6.5) y otra para $\psi^* = -i\pi/\hbar$ dada por

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \psi^*} - \frac{\partial}{\partial t} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\psi}^*} - \vec{\nabla}\cdot \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \vec{\nabla}\psi^*} = 0. \quad (6.11)$$

Para comprobar nuestro modelo, empecemos por utilizar la densidad Lagrangiana de la ecuación (6.6) y tomemos las siguientes derivadas

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \psi^*} = i\hbar\dot{\psi} - V\psi; \quad \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\psi}^*} = 0; \quad \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \vec{\nabla}\psi^*} = -\frac{\hbar^2}{2m}\vec{\nabla}\psi. \quad (6.12)$$

Reemplazando estas derivadas en la ecuación (6.11) nos dá inmediatamente la ecuación de Schrödinger (6.1), la cual no es más que una de las ecuaciones de movimiento en su forma Hamiltoniana.

De manera análoga, derivemos la densidad Lagrangiana en la ecuación (6.6) de la siguiente manera:

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \psi} = -V\psi^*; \quad \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\psi}} = i\hbar\psi^*; \quad \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \vec{\nabla}\psi} = -\frac{\hbar^2}{2m}\vec{\nabla}\psi^*, \quad (6.13)$$

derivadas que reemplazadas en la ecuación (6.5) me dan el complejo conjugado de la ecuación de Schrödinger, es decir, el complejo conjugado de la ecuación (6.1), que es la otra ecuación de movimiento en su forma Hamiltoniana.

Nótese finalmente que aunque la densidad Lagrangiana es única y esta dada por la ecuación (6.6), no hay simetría entre las ecuaciones (6.12) y (6.13).

6.2 Cuadragésimo séptima lección

En este capítulo miraremos la técnica empleada en mecánica cuántica para cuantizar los campos clásicos. En concreto, miraremos la cuantización del campo de partículas descrito por la función de onda ψ , solución a la ecuación de Schrödinger (6.1). Introduciremos igualmente el concepto de un conjunto completo de operadores y estudiaremos algunas de sus propiedades físicas.

La presente constituye otra de las nueve formulaciones de la mecánica cuántica conocida como segunda cuantización.

6.2.1 Segunda Cuantización

La hipótesis fundamental de trabajo es suponer ahora que ψ representa no una función de onda, sino un operador de campo, el que denotaremos por $\hat{\psi}$, el cual, junto con su operador canónico conjugado $\hat{\pi} \equiv i\hbar\hat{\psi}^\dagger$ (en lugar de $i\hbar\psi^*$ ya que se ha convertido en un operador), satisfacen las reglas de conmutación asignadas en los postulados de

la mecánica cuántica a los pares de variables canónico conjugadas. Es decir, satisfacen:

$$[\hat{\psi}(\vec{r}, t), \hat{\pi}(\vec{r}', t)] = i\hbar\delta^3(\vec{r} - \vec{r}'). \quad (6.14)$$

$$[\hat{\psi}(\vec{r}, t), \hat{\psi}(\vec{r}', t)] = [\hat{\pi}(\vec{r}, t), \hat{\pi}(\vec{r}', t)] = 0, \quad (6.15)$$

en donde, por tratarse de variables continuas relacionadas con un número infinito no contable de grados de libertad en la variable \vec{r} , se ha hecho la cuantización a la distribución delta de Dirac $\delta^3(\vec{r} - \vec{r}')$ en lugar de hacerlo a la delta de Kronecker $\delta_{\vec{r}, \vec{r}'}$. Como $\hat{\pi} = i\hbar\hat{\psi}^\dagger$, la primera y la última de estas relaciones son equivalentes a

$$[\hat{\psi}(\vec{r}, t), \hat{\psi}(\vec{r}', t)^\dagger] = \delta^3(\vec{r} - \vec{r}'). \quad (6.16)$$

$$[\hat{\psi}(\vec{r}, t)^\dagger, \hat{\psi}(\vec{r}', t)^\dagger] = 0. \quad (6.17)$$

Los conmutadores anteriores son conocidos en la literatura como los conmutadores canónicos en tiempos iguales, los que por postulado deben satisfacerse en todo instante de tiempo t .

6.2.2 Conjunto completo de operadores

Supongamos ahora que para el espacio de Hilbert del problema físico descrito por la ecuación de Schrödinger (6.1), existe un conjunto completo de funciones ortonormales $\phi_n(\vec{r}, t)$, $n = 0, 1, 2, \dots$, ($\int d\xi \phi_n^* \phi_l = \delta_{nl}$, con $n = 0$ definiendo por convención el estado fundamental del sistema). Esto permite expandir la función de onda $\psi(\vec{r}, t)$ en la forma

$$\psi(\vec{r}, t) = \sum_{n=0} a_n \phi_n(\vec{r}, t), \quad (6.18)$$

donde los coeficientes de expansión están dados por $a_n = \int d\xi \phi_n^* \psi$, los cuales se interpretan como la función de onda en la representación de la magnitud física cuyas autofunciones son las ϕ_n . Cuando las funciones de onda soluciones a la ecuación de Schrödinger pasan a ser operadores de campo, la expansión anterior se convierte en una sumatoria sobre un conjunto completo e infinito de operadores \hat{a}_n ,

$$\hat{\psi}(\vec{r}, t) = \sum_{n=0} \hat{a}_n \phi_n(\vec{r}, t), \quad \hat{\psi}(\vec{r}, t)^\dagger = \sum_{n=0} \hat{a}_n^\dagger \phi_n(\vec{r}, t)^*; \quad (6.19)$$

donde los coeficientes son ahora las funciones $\phi(\vec{r}, t)$ y el conjunto completo de operadores se define por la relación $\hat{a}_n \equiv \int d\xi \phi_n(\xi) \hat{\psi}(\xi)$. El álgebra detallada nos muestra ahora que los operadores \hat{a}_n y \hat{a}_n^\dagger deben satisfacer relaciones de conmutación específicas y compatibles con los conmutadores postulados en (6.14) y (6.17). Es decir, tenemos que

$$[\hat{\psi}(\vec{r}, t), \hat{\psi}(\vec{r}', t)^\dagger] = \sum_n \sum_l \phi_n(\vec{r}, t) \phi_l^*(\vec{r}', t) [\hat{a}_n, \hat{a}_l^\dagger] = \delta^3(\vec{r} - \vec{r}'),$$

donde la condición necesaria y suficiente para obtener la igualdad a través de la relación de completitud del conjunto completo de funciones

$$\sum_n \phi_n(\vec{r}, t) \phi_n^*(\vec{r}', t) = \delta^3(\vec{r} - \vec{r}'),$$

es pedir que se cumpla la identidad

$$[\hat{a}_n, \hat{a}_l^\dagger] = \delta_{nl}, \quad n, l = 0, 1, 2, \dots \quad (6.20)$$

De igual manera, las relaciones de conmutación (6.15) implican que el conjunto completo de operadores deben satisfacer igualmente las relaciones

$$[\hat{a}_n, \hat{a}_l] = [\hat{a}_n^\dagger, \hat{a}_l^\dagger] = 0, \quad n, l = 0, 1, 2, \dots \quad (6.21)$$

6.2.3 Operadores físicos

Partiendo de los operadores $\hat{\psi}$, $\hat{\psi}^\dagger$ y $\hat{\pi}$, podemos construir otros operadores de la teoría, algunos de ellos con significado físico relevante. En particular, el operador de Hamilton del campo, derivado en la ecuación (6.9), toma la forma

$$\begin{aligned} \hat{H} &= \int d^3r \hat{\psi}^\dagger \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V \right] \hat{\psi} = -\frac{i}{\hbar} \int d^3r \hat{\pi} H^{(0)} \hat{\psi} \\ &= \sum_l \sum_n \hat{a}_l^\dagger \hat{a}_n \int d^3r \phi(\vec{r}, t)_l^* H^{(0)} \phi(\vec{r}, t)_n = \sum_l \sum_n \hat{a}_l^\dagger \hat{a}_n (H^{(0)})_{ln}, \end{aligned} \quad (6.22)$$

donde

$$H^{(0)} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\vec{r}, t) \quad (6.23)$$

es el Hamiltoniano de la ecuación de Schrödinger (6.1), o sea el de una partícula individual del campo y $(H^{(0)})_{ln}$ es el elemento matricial l, n de dicho Hamiltoniano.

Otro operador relevante y de gran significado físico como veremos, es el operador número de partículas \hat{N} el cual se define como

$$\hat{N} = \int d^3r \hat{\psi}^\dagger \hat{\psi} = \sum_{n,l} \hat{a}_n^\dagger \hat{a}_l \int d^3r \phi_n^* \phi_l = \sum_l \hat{a}_l^\dagger \hat{a}_l = \sum_l \hat{n}_l, \quad (6.24)$$

donde se ha hecho uso de la ortonormalidad del conjunto completo de funciones $\phi_n(\vec{r}, t)$ y se ha definido el operador ocupación $\hat{n}_l \equiv \hat{a}_l^\dagger \hat{a}_l$.

Un álgebra simple nos permite calcular el siguiente conmutador

$$\begin{aligned} [\hat{n}_l, \hat{n}_k] &= [\hat{a}_l^\dagger \hat{a}_l, \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_k] = \hat{a}_l^\dagger [\hat{a}_l, \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_k] + [\hat{a}_l^\dagger, \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_k] \hat{a}_l \\ &= \hat{a}_l^\dagger [\hat{a}_l, \hat{a}_k^\dagger] \hat{a}_k + \hat{a}_l^\dagger \hat{a}_k^\dagger [\hat{a}_l, \hat{a}_k] + \hat{a}_k^\dagger [\hat{a}_l^\dagger, \hat{a}_k] \hat{a}_l + [\hat{a}_l^\dagger, \hat{a}_k^\dagger] \hat{a}_k \hat{a}_l \\ &= \hat{a}_l^\dagger \hat{a}_k \delta_{lk} - \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_l \delta_{kl} = (\hat{a}_l^\dagger \hat{a}_k - \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_l) \delta_{kl} = 0, \end{aligned}$$

para $n, k = 0, 1, 2, \dots$, donde se hizo uso reiterado de los conmutadores en (6.20) y (6.21). De este último conmutador podemos igualmente calcular

$$[\hat{N}, \hat{n}_l] = \left[\sum_{k=0} \hat{n}_k, \hat{n}_l \right] = \sum_{k=0} [\hat{n}_k, \hat{n}_l] = 0 \quad (6.25)$$

6.2.4 Ecuaciones de Movimiento

El operador Hamiltoniano (6.22) y los conmutadores de los postulados de cuantización nos permite ahora hallar de manera diferente las ecuaciones de movimiento del campo físico, al igual que definir leyes de conservación. En particular, el álgebra detallada nos permite calcular

conmutadores tales como $[\hat{\psi}, \hat{H}]$, $[\hat{\psi}^\dagger, \hat{H}]$ y $[\hat{N}, \hat{H}]$. Veámos:

$$\begin{aligned}
 [\hat{\psi}(\vec{r}, t), \hat{H}] &= [\hat{\psi}(\vec{r}, t), -\frac{i}{\hbar} \int d^3 r' \hat{\pi}(\vec{r}', t) H^{(0)} \hat{\psi}(\vec{r}', t)] \\
 &= -\frac{i}{\hbar} \int d^3 r' [\hat{\psi}(\vec{r}, t), \hat{\pi}(\vec{r}', t) H^{(0)} \hat{\psi}(\vec{r}', t)] \\
 &= -\frac{i}{\hbar} \int d^3 r' [\hat{\psi}(\vec{r}, t), \hat{\pi}(\vec{r}', t)] H^{(0)} \hat{\psi}(\vec{r}', t) \\
 &\quad - \frac{i}{\hbar} \int d^3 r' \hat{\pi}(\vec{r}', t) H^{(0)} [\hat{\psi}(\vec{r}, t), \hat{\psi}(\vec{r}', t)] \\
 &= -\frac{i}{\hbar} \int d^3 r' i \hbar \delta^3(\vec{r} - \vec{r}') H^{(0)} \hat{\psi}(\vec{r}', t) \\
 &= H^{(0)} \hat{\psi}(\vec{r}, t) = \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\vec{r}, t) \right\} \hat{\psi}(\vec{r}, t) \\
 &= i \hbar \dot{\hat{\psi}}(\vec{r}, t) = i \hbar \frac{d\hat{\psi}(\vec{r}, t)}{dt},
 \end{aligned}$$

donde hemos hecho uso de la ecuación de Schrödinger (6.1) en el último paso. Nótese que este último cálculo nos ha mostrado que

$$\dot{\hat{\psi}} = \frac{d\hat{\psi}}{dt} = -\frac{i}{\hbar} [\hat{\psi}(\vec{r}, t), \hat{H}], \quad (6.26)$$

que no es más que la ecuación de evolución temporal de los operadores en el llamado cuadro de Heissenberg de la mecánica cuántica. Mirado de otra manera podemos entonces concluir que la ecuación de Heissenberg de evolución temporal de un operador \hat{O} arbitrario, dada por

$$\dot{\hat{O}} = \frac{d\hat{O}}{dt} = -\frac{i}{\hbar} [\hat{O}, \hat{H}], \quad (6.27)$$

reproduce la ecuación clásica de movimiento del campo, o ecuación de Schrödinger cuando se aplica al operador de campo $\hat{\psi}$. Esto es una prueba clara de la consistencia de la teoría de campos cuánticos.

De manera análoga, pero procediendo ahora en sentido inverso, cal-

cualemos ahora la evolución temporal del operador $\hat{\pi}(\vec{r}, t)$:

$$\begin{aligned}
 i\hbar \frac{\partial \hat{\psi}^\dagger}{\partial t} &= \hat{\pi}(\vec{r}, t) = -\frac{i}{\hbar} [\hat{\pi}(\vec{r}, t), \hat{H}] = [\hat{\psi}^\dagger, \hat{H}] \\
 &= -\frac{i}{\hbar} [\hat{\pi}(\vec{r}, t), -\frac{i}{\hbar} \int d^3 r' \hat{\pi}(\vec{r}', t) H^{(0)} \hat{\psi}(\vec{r}', t)] \\
 &= -\frac{1}{\hbar^2} \int d^3 r' [\hat{\pi}(\vec{r}, t), \hat{\pi}(\vec{r}', t) H^{(0)} \hat{\psi}(\vec{r}', t)] \\
 &= -\frac{1}{\hbar^2} \int d^3 r' [\hat{\pi}(\vec{r}, t), \hat{\pi}(\vec{r}', t)] H^{(0)} \hat{\psi}(\vec{r}', t) \\
 &\quad - \frac{1}{\hbar^2} \int d^3 r' \hat{\pi}(\vec{r}', t) H^{(0)} [\hat{\pi}(\vec{r}, t), \psi(\vec{r}', t)] \\
 &= -\frac{i}{\hbar} \int d^3 r' \hat{\psi}(\vec{r}', t)^\dagger H^{(0)} [\hat{\pi}(\vec{r}, t), \psi(\vec{r}', t)] \\
 &= -\frac{i}{\hbar} \int d^3 r' \{H^{(0)} \hat{\psi}(\vec{r}', t)\}^\dagger [\hat{\pi}(\vec{r}, t), \psi(\vec{r}', t)] \\
 &= -\frac{i}{\hbar} \int d^3 r' H^{(0)} \hat{\psi}(\vec{r}', t)^\dagger (-i\hbar) \delta^3(\vec{r} - \vec{r}') \\
 &= -H^{(0)} \hat{\psi}(\vec{r}, t)^\dagger = -\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\vec{r}, t) \right\} \hat{\psi}(\vec{r}, t)^\dagger,
 \end{aligned}$$

en donde en el cuarto y quinto pasos se ha utilizado la hermiticidad del Hamiltoniano de una partícula $H^{(0)}$. La anterior ecuación corresponde al complejo conjugado de la ecuación de Schrödinger antes de realizar la segunda cuantización y representa una de las ecuaciones de movimiento de uno de los grados de libertad del problema físico.

Haciendo uso de los resultados anteriores, calculemos ahora \hat{N} :

$$\begin{aligned}
 \hat{N} &= -\frac{i}{\hbar} [\hat{N}, \hat{H}] = -\frac{i}{\hbar} \int d^3 r [\hat{\psi}^\dagger \hat{\psi}, \hat{H}] \\
 &= -\frac{i}{\hbar} \int d^3 r \{ \hat{\psi}^\dagger [\hat{\psi}, \hat{H}] + [\hat{\psi}^\dagger, \hat{H}] \hat{\psi} \} \\
 &= -\frac{i}{\hbar} \int d^3 r \{ \hat{\psi}^\dagger H^{(0)} \hat{\psi} - (H^{(0)} \hat{\psi}^\dagger) \hat{\psi} \} \\
 &= -\frac{i}{\hbar} \int d^3 r \{ \hat{\psi}^\dagger H^{(0)} \hat{\psi} - (H^{(0)} \hat{\psi})^\dagger \hat{\psi} \} = 0,
 \end{aligned}$$

donde en el último paso se ha hecho uso de la hermiticidad de $H^{(0)}$. El anterior resultado nos muestra que, la magnitud física asociada al operador \hat{N} no cambia con el tiempo; es decir, es una constante del movimiento, y además que $[\hat{N}, \hat{H}] = 0$, lo cual tiene como consecuencia que podamos diagonalizar simultáneamente los dos operadores.

6.2.5 Representación de la Energía

Aunque en la expansión en (6.19) el conjunto completo de funciones pueden ser las autofunciones de un observable (operador lineal, acotado y Hermítico) cualquiera del sistema físico individual, en la práctica el presente formalismo adquiere su máximo poder analítico cuando dicho observable corresponde al Hamiltoniano de una partícula individual del sistema, es decir, cuando se tiene el conjunto completo de autofunciones $\phi_n^E(\vec{r}, t)$ las cuales satisfacen:

$$H^{(0)}\phi_n^E(\vec{r}, t) = E_n^{(0)}\phi_n^E(\vec{r}, t),$$

con $H^{(0)} = V(\vec{r}, t) - \hbar^2\nabla^2/2m$, el Hamiltoniano de una partícula individual del campo dado por (6.23).

Cuando se usan las autofunciones de $H^{(0)}$ como el conjunto completo de funciones en las expansiones, se tiene el campo descrito por $\hat{\psi}(\vec{r}, t)$ en la llamada representación de la energía. En esta representación los elementos matriciales $(H^{(0)})_{nl}$ son diagonales de la forma a $E_n^0\delta_{nl}$ y el operador de Hamilton del campo \hat{H} en la ecuación (6.22) toma la forma

$$\hat{H} = \sum_l \hat{a}_l^\dagger \hat{a}_l E_l^{(0)} = \sum_l \hat{n}_l E_l^{(0)}, \quad (6.28)$$

donde \hat{n}_l es el operador número de ocupación definido en la ecuación (6.24).

6.3 Cuadragésimo octava lección

En esta lección introduciremos un conjunto completo de autovectores para los operadores \hat{H} y \hat{N} los cuales tienen un significado físico

simple y directo. A este conjunto completo de autovectores lo llamaremos la representación número de partículas.

El resultado obtenido en la lección anterior que $[\hat{N}, \hat{H}] = 0$, implica que podemos hallar autovectores simultáneos de los operadores \hat{N} y \hat{H} ; es decir, que estos operadores se pueden diagonalizar simultáneamente.

6.3.1 Representación número de partículas

Comencemos por estudiar primero los operadores $\hat{n}_l = \hat{a}_l^\dagger \hat{a}_l$, algunas de sus reglas de conmutación y el conjunto de sus autovalores y sus autovectores.

Hallemos primero los conmutadores de \hat{n}_k con \hat{a}_l y \hat{a}_l^\dagger . Un álgebra simple nos muestra que

$$[\hat{n}_k, \hat{a}_l] = [\hat{a}_k^\dagger \hat{a}_k, \hat{a}_l] = \hat{a}_k^\dagger [\hat{a}_k, \hat{a}_l] + [\hat{a}_k^\dagger, \hat{a}_l] \hat{a}_k = [\hat{a}_k^\dagger, \hat{a}_l] \hat{a}_k = -\hat{a}_k \delta_{kl}, \quad (6.29)$$

$$[\hat{n}_k, \hat{a}_l^\dagger] = [\hat{a}_k^\dagger \hat{a}_k, \hat{a}_l^\dagger] = \hat{a}_k^\dagger [\hat{a}_k, \hat{a}_l^\dagger] + [\hat{a}_k^\dagger, \hat{a}_l^\dagger] \hat{a}_k = \hat{a}_k^\dagger [\hat{a}_k, \hat{a}_l^\dagger] = \hat{a}_k^\dagger \delta_{kl}, \quad (6.30)$$

donde se hizo uso reiterado de los conmutadores en (6.20) y (6.21).

Sea ahora $|n'_l\rangle$ el autovector de \hat{n}_l de autovalor n'_l . Mostremos los siguientes teoremas:

Teorema 1

Si $|n'_l\rangle$ es autovector de \hat{n}_l de autovalor n'_l , entonces $\hat{a}_l^\dagger |n'_l\rangle$ es también autovector de \hat{n}_l de autovalos $(n'_l + 1)$.

La demostración es similar a varios teoremas que ya se han demostrado antes en estas notas. Apliquemos primero el operador \hat{n}_l al vector $\hat{a}_l^\dagger |n'_l\rangle$ y hagamos uso de la relación de conmutación (6.30) para el caso de $n = l$; tenemos:

$$\begin{aligned} \hat{n}_l(\hat{a}_l^\dagger |n'_l\rangle) &= (\hat{n}_l \hat{a}_l^\dagger) |n'_l\rangle = (\hat{a}_l^\dagger \hat{n}_l + \hat{a}_l^\dagger) |n'_l\rangle = (\hat{a}_l^\dagger n'_l + \hat{a}_l^\dagger) |n'_l\rangle \\ &= (n'_l + 1)(\hat{a}_l^\dagger |n'_l\rangle), \end{aligned}$$

donde se ha hecho uso de la hipótesis que $\hat{n}_l |n'_l\rangle = n'_l |n'_l\rangle$.

Hemos mostrado de esta forma que

$$\hat{a}_l^\dagger |n'_l\rangle \sim |n'_l + 1\rangle$$

la cual podemos iterar $(\hat{a}_l^\dagger)^2 |n'_l\rangle \sim |n'_l + 2\rangle, \dots (\hat{a}_l^\dagger)^k |n'_l\rangle \sim |n'_l + k\rangle$ para k un número entero positivo.

De manera similar podemos demostrar el siguiente teorema:

Teorema 2

Si $|n'_l\rangle$ es autovector de \hat{n}_l de autovalor n'_l , entonces $\hat{a}_l |n'_l\rangle$ es también autovector de \hat{n}_l de autovalos $(n'_l - 1)$.

De manera similar, apliquemos el operador \hat{n}_l al vector $\hat{a}_l |n'_l\rangle$ y hagamos uso de la relación de conmutación (6.29) para el caso de $n = l$; tenemos:

$$\begin{aligned} \hat{n}_l(\hat{a}_l |n'_l\rangle) &= (\hat{n}_l \hat{a}_l) |n'_l\rangle = (\hat{a}_l \hat{n}_l - \hat{a}_l) |n'_l\rangle = (\hat{a}_l n'_l - \hat{a}_l) |n'_l\rangle \\ &= (n'_l - 1)(\hat{a}_l |n'_l\rangle). \end{aligned}$$

Hemos mostrado de esta forma que

$$\hat{a}_l |n'_l\rangle \sim |n'_l - 1\rangle$$

la cual podemos iterar $(\hat{a}_l)^2 |n'_l\rangle \sim |n'_l - 2\rangle, \dots (\hat{a}_l)^k |n'_l\rangle \sim |n'_l - k\rangle$ para k un número entero positivo.

Los dos teoremas anteriores nos permiten llamar a los operadores \hat{a}_l^\dagger y \hat{a}_l , operadores de creación y de destrucción respectivamente, del número de ocupación del estado l .

Teorema 3

Los valores esperados del operador \hat{n}_l son positivos definidos.

Para la demostración, asumamos que $|\phi\rangle$ es el vector de estado normalizado ($\langle\phi|\phi\rangle = 1$) que me representa mi sistema físico. Entonces:

$$\begin{aligned} \langle\phi|\hat{n}_l|\phi\rangle &= \langle\hat{n}_l\rangle_\phi = \int d\xi \phi^* \hat{n}_l \phi = \int d\xi \phi^* \hat{a}_l^\dagger \hat{a}_l \phi \\ &= \int d\xi (\hat{a}_l \phi)^* \hat{a}_l \phi = \int d\xi |\hat{a}_l \phi|^2 \geq 0, \end{aligned}$$

donde se ha hecho uso de la relación $(\hat{a}_l^\dagger)^\dagger = \hat{a}_l$. Este último teorema nos ha mostrado que para todo $l = 0, 1, 2, \dots$, el operador \hat{n}_l está acotado inferiormente.

Combinando todo lo anterior tenemos que aplicaciones repetidas del operador de destrucción \hat{a}_l a un ket arbitrario va a conducir a dificultades ya que el operador número de ocupación es positivo definido, a no ser que exista un estado de ocupación fundamental $|0_l\rangle$ para el cual $\hat{a}_l|0_l\rangle = 0$.

De esta manera, la teoría de campos cuánticos comienza por postular la existencia de un estado fundamental $|0_l\rangle$ para el *elésimo* estado cuántico, el cual está normalizado a la unidad ($\langle 0_l|0_l\rangle = 1$) y satisface $\hat{n}_l|0_l\rangle = 0$. A partir de este estado y por una aplicación sucesiva del operador de creación \hat{a}_l^\dagger sobre $|0_l\rangle$, obtenemos el conjunto completo de autoestados del operador número de ocupación del estado l , el cual está dado por:

$$|0'_l\rangle, |1'_l\rangle, |2'_l\rangle, |3'_l\rangle, \dots, |n'_l\rangle, \dots$$

Es decir, los autovalores del operador número de ocupación del *elésimo* estado \hat{n}_l son los números enteros positivos $0, 1, 2, 3, \dots$ los cuales interpretamos de la siguiente manera:

- $|0'_l\rangle$ autoestado con cero partículas de número cuántico l (el vacío del estado l).
- $|1'_l\rangle = \hat{a}_l^\dagger|0'_l\rangle/\sqrt{1!}$ autoestado con una partícula de número cuántico l .
- $|2'_l\rangle = (\hat{a}_l^\dagger)^2|0'_l\rangle/\sqrt{2!}$ autoestado con dos partículas de número cuántico l .
- $|3'_l\rangle = (\hat{a}_l^\dagger)^3|0'_l\rangle/\sqrt{3!}$ autoestado con tres partículas de número cuántico l .
- ...
- $|n'_l\rangle = (\hat{a}_l^\dagger)^{n'_l}|0'_l\rangle/\sqrt{n'_l!}$, autoestado con n'_l partículas de número cuántico l .

El valor de los denominadores ha sido escogido tal que el estado $|n'_l\rangle$ esté normalizado a la unidad, lo cual se puede ver al construir el vector dual de $|n'_l\rangle$ el cual está dado por $\langle n'_l| = \langle 0_l|(\hat{a}_l)^{n'_l}/\sqrt{n'_l!}$.

Ahora, en la expansión (6.19), tomamos por convención el índice n corriendo desde el estado fundamental ($n = 0$) hasta un valor infinito contable (el número total de estados cuánticos de una partícula individual del sistema). De esta manera, el conjunto completo de operadores

$$\{\hat{a}_0^\dagger, \hat{a}_1^\dagger, \hat{a}_2^\dagger, \dots, \hat{a}_l^\dagger, \dots\}$$

y el estado vacío $|\vec{0}\rangle$ del campo cuántico definido por

$$|\vec{0}\rangle = |0'_0, 0'_1, 0'_2, \dots, 0'_l, \dots\rangle \equiv |0'_0\rangle|0'_1\rangle|0'_2\rangle \dots |0'_l\rangle \dots,$$

el cual asumimos normalizado a la unidad ($\langle\vec{0}|\vec{0}\rangle = 1$), nos permiten definir el siguiente conjunto completo de vectores ortonormales:

$$|n'_0, n'_1, n'_2, \dots, n'_l, \dots\rangle = \frac{(\hat{a}_0^\dagger)^{n_0}(\hat{a}_1^\dagger)^{n_1}(\hat{a}_2^\dagger)^{n_2} \dots (\hat{a}_l^\dagger)^{n_l} \dots |\vec{0}\rangle}{\sqrt{n'_0!n'_1!n'_2! \dots n'_l! \dots}}, \quad (6.31)$$

los cuales satisfacen las siguientes relaciones:

$$\begin{aligned} \hat{n}_l |n'_0, n'_1, n'_2, \dots, n'_l, \dots\rangle &= n'_l |n'_0, n'_1, n'_2, \dots, n'_l, \dots\rangle \\ \hat{N} |n'_0, n'_1, n'_2, \dots, n'_l, \dots\rangle &= \sum_{k=0} \hat{n}_k |n'_0, n'_1, n'_2, \dots, n'_l, \dots\rangle \\ \hat{N} |n'_0, n'_1, n'_2, \dots, n'_l, \dots\rangle &= \sum_{k=0} n'_k |n'_0, n'_1, n'_2, \dots, n'_l, \dots\rangle \\ &= N |n'_0, n'_1, n'_2, \dots, n'_l, \dots\rangle, \end{aligned}$$

donde hemos definido $N = \sum_{k=0} n'_k$ como el número total de partículas asociadas con el estado $|n'_0, n'_1, n'_2, \dots, n'_l, \dots\rangle$.

Este conjunto completo de vectores es ortonormal; es decir, satisfacen la relación:

$$\langle n''_0, n''_1, n''_2, \dots, n''_l, \dots | n'_0, n'_1, n'_2, \dots, n'_l, \dots \rangle = \delta_{n''_0 n'_0} \delta_{n''_1 n'_1} \dots \delta_{n''_l n'_l},$$

con $n'_k, n''_k = 0, 1, 2, \dots$ números enteros positivos. Además, este conjunto completo de vectores en (6.31) son autovectores del Hamiltoniano

del campo cuando se trabaja en la representación de la energía, ya que de acuerdo a la ecuación (6.28) tenemos

$$\begin{aligned}
 \hat{H}|n'_0, n'_1, n'_2, \dots, n'_l, \dots\rangle &= \sum_{k=0} E_k^{(0)} \hat{n}_k |n'_0, n'_1, n'_2, \dots, n'_l, \dots\rangle \\
 &= \sum_{k=0} E_k^{(0)} n'_k |n'_0, n'_1, n'_2, \dots, n'_l, \dots\rangle \\
 &= E_T |n'_0, n'_1, n'_2, \dots, n'_l, \dots\rangle, \quad (6.32)
 \end{aligned}$$

donde hemos definido $E_T = \sum_{k=0} E_k^{(0)} n'_k$ como la energía total del sistema físico asociadas con el estado $|n'_0, n'_1, n'_2, \dots, n'_l, \dots\rangle$.

Al conjunto completo de autovectores

$$|n'_0, n'_1, n'_2, \dots, n'_l, \dots\rangle,$$

se le conoce como la representación número de partículas del campo cuántico, ya que lo podemos interpretar como representando un número N de partículas, de las cuales n'_0 están ocupando el estado fundamental, n'_1 están ocupando el primer estado excitado, n'_2 el segundo estado excitado, etc., tales que $\sum_k n_k = N$.

6.4 Cuadragésimo novena lección

Introduciremos en esta lección otro conjunto completo de vectores para el campo cuántico, los cuales son una base del llamado espacio de Fock, y miraremos la relación que hay entre este conjunto completo de vectores y el que se introdujo en la lección anterior.

6.4.1 Espacio de Fock

Vamos de manera sistemática a introducir los vectores de estado que me describen una, dos, tres y más partículas en posiciones bien definidas del espacio tiempo, y la relación que hay entre esta formulación de segunda cuantización y la formulación de Schrödinger para dos o más partículas idénticas.

Estado de una partícula

Haciendo uso de la propiedad del vacío que $\hat{a}_l|\vec{0}\rangle = 0$ para $l = 0, 1, 2, \dots$ y de la expansión en la ecuación (6.19), es simple ver que $\hat{\psi}(\vec{r}, t)|\vec{0}\rangle = \sum_l \phi_l(\vec{r}, t)\hat{a}_l|\vec{0}\rangle = 0|\vec{0}\rangle = 0$. Pero cual es el significado físico de la expresión

$$|\Phi(\vec{r}_1, t)\rangle \equiv \hat{\psi}(\vec{r}_1, t)^\dagger|\vec{0}\rangle = \sum_{n=0} \phi_n(\vec{r}_1, t)^* \hat{a}_n^\dagger|\vec{0}\rangle \quad ?$$

Veámos primero que, como la notación lo indica, $|\Phi(\vec{r}_1, t)\rangle$ es un vector de estado y no un operador, ya que es una combinación lineal de los vectores de estado $\hat{a}_n^\dagger|\vec{0}\rangle$, con coeficientes de expansión dados por $\phi_n(\vec{r}_1, t)^*$ los que podemos interpretar como una amplitud de probabilidad. Note igualmente que como elemento matemático, está asociado a un estado de una sola partícula, lo cual puede verse al operar sobre este elemento con el operador número de partículas \hat{N} y ver que es un autovalor de este operador, de autovalor uno:

$$\begin{aligned} \hat{N}|\Phi(\vec{r}_1, t)\rangle &= \hat{N}\hat{\psi}^\dagger(\vec{r}_1, t)|\vec{0}\rangle = \int d^3r \{\hat{\psi}^\dagger(\vec{r}, t)\hat{\psi}(\vec{r}, t)\}\hat{\psi}^\dagger(\vec{r}_1, t)|\vec{0}\rangle \\ &= \int d^3r \hat{\psi}^\dagger(\vec{r}, t)\{\hat{\psi}(\vec{r}, t)\hat{\psi}^\dagger(\vec{r}_1, t)\}|\vec{0}\rangle \\ &= \int d^3r \hat{\psi}^\dagger(\vec{r}, t)\{\hat{\psi}^\dagger(\vec{r}_1, t)\hat{\psi}(\vec{r}, t) + \delta^3(\vec{r}_1 - \vec{r})\}|\vec{0}\rangle \\ &= \hat{\psi}^\dagger(\vec{r}_1, t)|\vec{0}\rangle = |\Phi(\vec{r}_1, t)\rangle, \end{aligned}$$

donde se ha utilizado la definición de \hat{N} dada en la ecuación (6.24) y en el tercer renglón se ha hecho uso del conmutador en (6.16) y de la propiedad $\hat{\psi}(\vec{r}, t)|\vec{0}\rangle = 0$.

Podemos así interpretar el vector de estado $|\Phi(\vec{r}_1, t)\rangle = \hat{\psi}^\dagger(\vec{r}_1, t)|\vec{0}\rangle$ como un vector que describe una partícula del campo en la posición (\vec{r}_1, t) del espacio-tiempo, la cual no posee un único valor de la energía (como debe ser de conformidad con las relaciones de incertidumbre), ya que el estado es una combinación lineal de todos los estados posibles de energía $E_n^{(0)}$, cada estado con amplitud de probabilidad dada por la

función de onda de Schrödinger $\phi_n(\vec{r}_1, t)^*$, autofunción del Hamiltoniano $H^{(0)}$ de una partícula individual del campo.

Note igualmente que $\langle \vec{0} | \Phi(\vec{r}_1, t) \rangle = \langle \vec{0} | \hat{\psi}(\vec{r}_1, t)^\dagger | \vec{0} \rangle = 0$, debido a la ortogonalidad de los vectores en la representación número de partículas. Sin embargo, un cálculo simple nos muestra que

$$\begin{aligned} \langle 0_0, 0_1, 0_2, \dots, 1_l, 0_{l+1}, 0_{l+2}, \dots | \Phi(\vec{r}_1, t) \rangle &= (\langle \vec{0} | \hat{a}_l | \Phi(\vec{r}_1, t) \rangle) \quad (6.33) \\ &= \langle \vec{0} | \hat{a}_l \sum_n \phi_n^*(\vec{r}_1, t) \hat{a}_n^\dagger | \vec{0} \rangle = \sum_n \phi_n^*(\vec{r}_1, t) \langle \vec{0} | \hat{\delta}_{nl} + a_n^\dagger \hat{a}_l | \vec{0} \rangle = \phi_l^*(\vec{r}_1, t), \end{aligned}$$

de donde podemos ver que la función de onda de Schrödinger de una partícula individual en el estado de energía $E_l^{(0)}$ está dada por

$$\phi_l(\vec{r}_1, t) = \langle \Phi(\vec{r}_1, t) | (\hat{a}_l^\dagger | \vec{0} \rangle)$$

Estado de dos partículas

Definamos ahora el vector de estado

$$\begin{aligned} |\Phi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, t) \rangle &\equiv \hat{\psi}(\vec{r}_1, t)^\dagger \hat{\psi}(\vec{r}_2, t)^\dagger | \vec{0} \rangle / \sqrt{2} \quad (6.34) \\ &= \sum_n \sum_l \phi_n(\vec{r}_1, t)^* \phi_l(\vec{r}_2, t)^* \hat{a}_n^\dagger \hat{a}_l^\dagger | \vec{0} \rangle / \sqrt{2}, \end{aligned}$$

y comencemos por actuar sobre este vector con el operador número de partículas \hat{N} , donde para simplificar cálculos hagamos las definiciones $\hat{\psi}_1^\dagger = \hat{\psi}(\vec{r}_1, t)^\dagger$ y $\hat{\psi}_2^\dagger = \hat{\psi}(\vec{r}_2, t)^\dagger$

$$\begin{aligned} \hat{N} |\Phi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, t) \rangle &= \left\{ \int d^3r \hat{\psi}(\vec{r}, t)^\dagger \hat{\psi}(\vec{r}, t) \right\} \hat{\psi}_1^\dagger \hat{\psi}_2^\dagger | \vec{0} \rangle / \sqrt{2} \\ &= \int d^3r \hat{\psi}(\vec{r}, t)^\dagger \{ \hat{\psi}_1^\dagger \hat{\psi}_2^\dagger \} \hat{\psi}(\vec{r}, t) | \vec{0} \rangle / \sqrt{2} \\ &= \int d^3r \hat{\psi}(\vec{r}, t)^\dagger \{ \hat{\psi}_1^\dagger \hat{\psi}(\vec{r}, t) + \delta^3(\vec{r}_1 - \vec{r}) \} \hat{\psi}_2^\dagger | \vec{0} \rangle / \sqrt{2} \\ &= \left\{ \int d^3r \hat{\psi}(\vec{r}, t)^\dagger \hat{\psi}_1^\dagger \hat{\psi}(\vec{r}, t) \hat{\psi}_2^\dagger \right\} / | \vec{0} \rangle \sqrt{2} + \{ \hat{\psi}_1^\dagger \hat{\psi}_2^\dagger | \vec{0} \rangle \} / \sqrt{2} \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} \int d^3r \hat{\psi}(\vec{r}, t)^\dagger \hat{\psi}_1^\dagger \{ \hat{\psi}_2^\dagger \hat{\psi}(\vec{r}, t) + \delta^3(\vec{r}_2 - \vec{r}) \} | \vec{0} \rangle + |\Phi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, t) \rangle \\ &= \hat{\psi}_2^\dagger \hat{\psi}_1^\dagger | \vec{0} \rangle / \sqrt{2} + |\Phi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, t) \rangle = 2 |\Phi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, t) \rangle, \end{aligned} \quad (6.35)$$

donde en el último paso hemos usado el hecho que $\hat{\psi}_2^\dagger \hat{\psi}_1^\dagger = \hat{\psi}_1^\dagger \hat{\psi}_2^\dagger$.

Podemos entonces interpretar el vector $|\Phi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, t)\rangle$ como un vector que describe dos partículas del campo, una en la posición (\vec{r}_1, t) y la otra en la posición (\vec{r}_2, t) del espacio-tiempo. Ninguna de las partículas posee un único valor de la energía ya que el estado es una combinación lineal de todos los estados posibles de energía $E_n^{(0)} + E_l^{(0)}$, $n, l = 0, 1, 2, 3, \dots$, cada estado con amplitud de probabilidad dada por la función de onda de Schrödinger $\phi_n(\vec{r}_1, t)^* \phi_l(\vec{r}_2, t)^*$.

Un álgebra simple nos permite ahora mostrar las siguientes propiedades del vector $|\Phi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, t)\rangle$:

$$\begin{aligned} \langle \Phi(\vec{r}_3, t) | \Phi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, t) \rangle &= 0 \\ \langle \Phi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, t) | \Phi(\vec{r}'_1, \vec{r}'_2, t) \rangle &= [\delta^3(\vec{r}_1 - \vec{r}'_1) \delta^3(\vec{r}_2 - \vec{r}'_2) + \delta^3(\vec{r}_1 - \vec{r}'_2) \delta^3(\vec{r}_2 - \vec{r}'_1)] \\ \langle 0, 0, \dots, 2_l, 0_{l+1}, \dots, | \Phi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, t) \rangle &= \phi_l(\vec{r}_1, t)^* \phi_l(\vec{r}_2, t)^* \\ \langle 0, 0, \dots, 1_l, 0_{l+1}, \dots, 1_n, 0_{n+1}, \dots, | \Phi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, t) \rangle &= \\ [\phi_l(\vec{r}_1, t)^* \phi_n(\vec{r}_2, t)^* + \phi_n(\vec{r}_1, t)^* \phi_l(\vec{r}_2, t)^*] / \sqrt{2} & \quad (6.36) \end{aligned}$$

de donde podemos ver que la función de onda de Schrödinger debidamente simetrizada, para dos partículas idénticas, una en el estado de energía $E_l^{(0)}$ y la otra en el estado $E_n^{(0)}$ está dada por

$$\begin{aligned} \mathcal{P}[\phi_l(\vec{r}_1, t) \phi_n(\vec{r}_2, t)] / \sqrt{2} &= [\phi_l(\vec{r}_1, t) \phi_n(\vec{r}_2, t) + \phi_n(\vec{r}_1, t) \phi_l(\vec{r}_2, t)] / \sqrt{2} \\ &= \langle \Phi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, t) | (\hat{a}_l^\dagger \hat{a}_n^\dagger | \vec{0} \rangle) \end{aligned}$$

Estado de tres partículas

Definamos ahora el vector de estado

$$\begin{aligned} |\Phi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \vec{r}_3, t)\rangle &\equiv \hat{\psi}(\vec{r}_1, t)^\dagger \hat{\psi}(\vec{r}_2, t)^\dagger \hat{\psi}(\vec{r}_3, t)^\dagger | \vec{0} \rangle / \sqrt{3!} \\ &= \sum_n \sum_l \sum_k \phi_n(\vec{r}_1, t)^* \phi_l(\vec{r}_2, t)^* \phi_k(\vec{r}_3, t)^* \hat{a}_n^\dagger \hat{a}_l^\dagger \hat{a}_k^\dagger | \vec{0} \rangle / \sqrt{3}. \end{aligned} \quad (6.37)$$

El álgebra nos muestra ahora que este es un estado de tres partículas, ya que:

$$\hat{N} |\Phi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \vec{r}_3, t)\rangle = 3 |\Phi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \vec{r}_3, t)\rangle. \quad (6.38)$$

De esta manera se puede interpretar el vector $|\Phi(\vec{r}_1\vec{r}_2, \vec{r}_3, t)\rangle$ como un vector que describe tres partículas del campo, una en la posición (\vec{r}_1, t) , la otra en la posición (\vec{r}_2, t) y la tercera en la posición (\vec{r}_3, t) . Ninguna de las partículas poseyendo un único valor de la energía ya que el estado es una combinación lineal de todos los estados posibles de energía $E_n^{(0)} + E_l^{(0)} + E_k^{(0)}$, $n, l, k = 0, 1, 2, 3, \dots$.

Un álgebra simple nos permite ahora mostrar las siguientes propiedades del vector $|\Phi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \vec{r}_3, t)\rangle$:

$$\begin{aligned} \langle \Phi(\vec{r}_4, t) | \Phi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \vec{r}_3, t) \rangle &= 0 \\ \langle \Phi(\vec{r}_4, \vec{r}_5, t) | \Phi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \vec{r}_3, t) \rangle &= 0 \\ \langle \Phi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \vec{r}_3, t) | \Phi(\vec{r}'_1, \vec{r}'_2, \vec{r}'_3, t) \rangle &= \mathcal{P}[\delta^3(\vec{r}_1 - \vec{r}'_1)\delta^3(\vec{r}_2 - \vec{r}'_2)\delta^3(\vec{r}_3 - \vec{r}'_3)]. \\ \langle 0, 0, \dots, 3_l, 0_{l+1}, \dots, | \Phi(\vec{r}_1\vec{r}_2, \vec{r}_3, t) \rangle &= \phi_l(\vec{r}_1, t)^* \phi_l(\vec{r}_2, t)^* \phi_l(\vec{r}_3, t)^* \\ \langle 0, 0, \dots, 1_l, 0_{l+1}, \dots, 1_n, 0_{n+1}, \dots, 1_k, \dots | \Phi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \vec{r}_3, t) \rangle &= \\ \mathcal{P}[\phi_l(\vec{r}_1, t)^* \phi_n(\vec{r}_2, t)^* \phi_k(\vec{r}_3, t)^*] / \sqrt{6}. & \quad (6.39) \end{aligned}$$

de donde de nuevo la función de onda de Schrödinger debidamente simetrizada, para tres partículas idénticas, una en el estado de energía $E_l^{(0)}$, la otra en el estado $E_n^{(0)}$ y la tercera en el estado de energía $E_k^{(0)}$ está dada por

$$\mathcal{P}[\phi_l(\vec{r}_1, t)\phi_n(\vec{r}_2, t)\phi_k(\vec{r}_3, t)]/6 = \langle \Phi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \vec{r}_3, t) | (\hat{a}_l^\dagger \hat{a}_n^\dagger \hat{a}_k^\dagger | \vec{0} \rangle) \rangle / \sqrt{6}$$

donde en las ecuaciones anteriores la permutación \mathcal{P} es

$$\begin{aligned} \mathcal{P}[\phi_l(\vec{r}_1, t)^* \phi_n(\vec{r}_2, t)^* \phi_k(\vec{r}_3, t)^*] &= \phi_l(\vec{r}_1, t)^* \phi_n(\vec{r}_2, t)^* \phi_k(\vec{r}_3, t)^* \\ &+ \phi_l(\vec{r}_1, t)^* \phi_k(\vec{r}_2, t)^* \phi_n(\vec{r}_3, t)^* + \phi_k(\vec{r}_1, t)^* \phi_n(\vec{r}_2, t)^* \phi_l(\vec{r}_3, t)^* \\ &+ \phi_k(\vec{r}_1, t)^* \phi_l(\vec{r}_2, t)^* \phi_n(\vec{r}_3, t)^* + \phi_n(\vec{r}_1, t)^* \phi_l(\vec{r}_2, t)^* \phi_k(\vec{r}_3, t)^* + \\ &\phi_n(\vec{r}_1, t)^* \phi_k(\vec{r}_2, t)^* \phi_l(\vec{r}_3, t)^*, \end{aligned}$$

la cual corresponde a todas las permutaciones posibles de los tres números cuánticos (lnm) . Esta última ecuación nos da el complejo conjugado de la función de onda de Schrödinger debidamente simetrizada, para tres partículas idénticas, una de ellas en el estado de energía $E_l^{(0)}$, la otra en el estado $E_n^{(0)}$ y la tercera en el estado $E_k^{(0)}$.

Estado con f partículas

Procediendo de esta manera podemos definir el estado correspondiente a f partículas situadas en las posiciones $(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \vec{r}_3, \dots, \vec{r}_f)$ de la siguiente manera:

$$\begin{aligned} |\Phi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_f, t)\rangle &\equiv \hat{\psi}(\vec{r}_1, t)^\dagger \hat{\psi}(\vec{r}_2, t)^\dagger \dots \hat{\psi}(\vec{r}_f, t)^\dagger |\vec{0}\rangle / \sqrt{f!} \quad (6.40) \\ &= \sum_{n_1 n_2 \dots n_f} \phi_{n_1}(\vec{r}_1, t)^* \phi_{n_2}(\vec{r}_2, t)^* \dots \phi_{n_f}(\vec{r}_f, t)^* \hat{a}_{n_1}^\dagger \hat{a}_{n_2}^\dagger \dots \hat{a}_{n_f}^\dagger |\vec{0}\rangle / \sqrt{f!}, \end{aligned}$$

el cual está normalizado a la unidad debido al denominador $\sqrt{f!}$ y es ortogonal a los estados

$$|\Phi(\vec{r}_1, t)\rangle, |\Phi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, t)\rangle, |\Phi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \vec{r}_3, t)\rangle \dots, |\Phi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \vec{r}_3, \dots, \vec{r}_{f-1}, t)\rangle.$$

Al igual que antes el álgebra nos muestra que

$$\begin{aligned} \langle \vec{0} | \hat{\psi}(\vec{r}_f, t) \dots \hat{\psi}(\vec{r}_2, t) \hat{\psi}(\vec{r}_1, t) | \hat{a}_{n_1}^\dagger \hat{a}_{n_2}^\dagger \dots \hat{a}_{n_f}^\dagger |\vec{0}\rangle / f! \quad (6.41) \\ = \mathcal{P}[\phi_{n_1}(\vec{r}_1, t) \phi_{n_2}(\vec{r}_2, t) \dots \phi_{n_f}(\vec{r}_f, t) / f!,] \end{aligned}$$

es la función de onda de Schrödinger propiamente simetrizada.

La interpretación que se da al análisis anterior, es que tanto los vectores de la representación de Fock, como los vectores de la representación número de partículas, formán dos conjuntos completos de vectores que expanden el espacio. Yo puedo entonces expandir un vector del espacio en la representación número de partículas en el conjunto completo de vectores en la representación de Fock (y viceversa). Los coeficientes de cada uno de los términos de dicha expansión corresponden a las funciones de onda de Schrödinger debidamente simetrizadas.

Resumiendo todas las consideraciones anteriores podemos afirmar que, la característica más importante que presenta el método de segunda cuantización, es el reemplazo de la función de onda de Schrödinger para muchas partículas idénticas, por objetos matemáticos que están formados por funciones de onda de una sola partícula, las cuales poseen de manera intrínseca la simetría requerida.

6.5 Quincuagésima lección

En la lección anterior hicimos el estudio de un campo cuántico constituido por un número de partículas las cuales no interactúan entre sí. En esta lección miraremos una manera simple de como manejar la interacción entre las partículas que conforman el campo cuántico, haciendo uso de la teoría de perturbaciones estudiada en la trigésimo primera lección. Sin lugar a dudas, es en este problema que se pueden apreciar las grandes ventajas que tiene el formalismo de la segunda cuantización.

6.5.1 Interacción entre dos partículas

Empezaremos primero por considerar una interacción estática (independiente del tiempo) y central, entre pares de partículas (la generalización a interacciones entre tres o más partículas y a fuerzas no centrales procede de manera análoga).

La ecuación de Schrödinger para un sistema de f partículas idénticas de masa m que interactúan con un potencial externo de la forma $V(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_f, t) = \sum_i V(\vec{r}_i, t)$, y que interactúan además por pares entre sí con un potencial simétrico de la forma $V(\vec{r}_i, \vec{r}_j,)$, toma la forma

$$i\hbar \frac{\partial \phi}{\partial t} = \sum_{i=1}^f \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_i^2 + V(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_f, t) + \sum_{i < j} V(\vec{r}_i, \vec{r}_j) \right] \phi, \quad (6.42)$$

donde $\phi = \phi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_f, t)$ es la función de onda debidamente simetrizada para las f partículas idénticas. La solución de esta ecuación para un sistema de tres o más partículas, es en general de una complejidad imposible de manejar desde el punto de vista matemático y es en la implementación de un método para resolver esta ecuación, así sea de manera aproximada, que la técnica de la segunda cuantización, adquiere su mayor relevancia.

Comencemos primero por ver como incluimos el término de interacción entre dos partículas $V(\vec{r}_i, \vec{r}_j)$ en la ecuación de campo (6.1), antes de cuantizar el campo. Como en el formalismo de la segunda cuantización las partículas se consideran cuantos del campo, la interacción

entre dos partículas del campo se debe mirar como una interacción del campo consigo mismo, lo cual nos conduce de manera inmediata a una ecuación de campo no lineal.

Para construir el término de autointeracción del campo, razonemos de la siguiente manera: si una unidad del campo situado en la posición \vec{r} interactúa con otra unidad del campo en la posición \vec{r}' mediante un potencial de la forma $V'(\vec{r}', \vec{r})$, entonces la cantidad total de materia del campo, producirá en el punto \vec{r} , un potencial total de la forma $V(\vec{r}) = \int d^3r' \rho(\vec{r}') V'(\vec{r}', \vec{r})$, donde $\rho(\vec{r}')$ es la densidad de materia del campo. Haciendo ahora uso del hecho que el número total de partículas N está dado por

$$N = \int d^3r \psi^* \psi = \sum_k a_k^* a_k = \sum_k n_k, \quad (6.43)$$

(ecuaciones que habíamos considerado para el caso ya cuantizado, pero que son igualmente válidas antes de cuantizar el campo), podemos interpretar la expresión $\psi^* \psi$ como la densidad de materia del campo cuántico. Entonces para el caso de la interacción entre dos cuerpos solamente, podemos reemplazar la ecuación del campo cuántico (6.1) por la siguiente ecuación:

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi + V(\vec{r}, t) \psi + \left[\int d^3r' \psi^*(\vec{r}', t) V'(\vec{r}', \vec{r}, t) \psi(\vec{r}', t) \right] \psi, \quad (6.44)$$

con $\psi = \psi(\vec{r}, t)$ la amplitud del campo cuántico, solución a la anterior ecuación integrodiferencial. El siguiente paso es encontrar el Hamiltoniano correspondiente a este campo cuántico. Para eso comencemos por construir una densidad Lagrangiana que generalice la expresión (6.6) cuando se incluye el término de autointeracción. Es fácil ver que esta nueva densidad Lagrangiana la podemos escribir como

$$\begin{aligned} \mathcal{L}^{int} &= i\hbar \psi^* \dot{\psi} - \frac{\hbar^2}{2m} \vec{\nabla} \psi^* \cdot \vec{\nabla} \psi - V(\vec{r}, t) \psi^* \psi \\ &\quad + \int d^3r' \psi^*(\vec{r}', t) \psi^*(\vec{r}, t) V'(\vec{r}, \vec{r}', t) \psi(\vec{r}, t) \psi(\vec{r}', t) \\ &= \mathcal{L} + \mathcal{L}', \end{aligned} \quad (6.45)$$

donde \mathcal{L} es la densidad Lagrangiana en (6.6) antes de incluir la interacción entre las partículas del campo y \mathcal{L}' corresponde al término de dicha interacción. El orden de los campos ψ^* y ψ que aparecen en \mathcal{L}' es fundamental, ya que una vez cuantizado el campo, los operadores $\hat{\psi}^\dagger$ y $\hat{\psi}$ no van a conmutar.

Debido a que \mathcal{L}' no contiene términos proporcionales a $\dot{\psi}$, entonces la variable canónica conjugada a ψ es, al igual que antes

$$\pi(\vec{r}, t) = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\psi}} = i\hbar\psi^*(\vec{r}, t),$$

lo cual nos permite dos cosas: primero, cuantizar el campo de materia; es decir, convertir a ψ y a π en operadores cuánticos $\hat{\psi}$ y $\hat{\pi}$, los cuales satisfacen las relaciones de conmutación (6.14) y (6.15), es decir

$$[\hat{\psi}(\vec{r}, t), \hat{\pi}(\vec{r}', t)] = i\hbar\delta^3(\vec{r} - \vec{r}'),$$

$$[\hat{\psi}(\vec{r}, t), \hat{\psi}(\vec{r}', t)] = [\hat{\pi}(\vec{r}, t), \hat{\pi}(\vec{r}', t)] = 0;$$

segundo podemos construir la densidad Hamiltoniana del sistema a través de la transformación de Legendre $\hat{\mathcal{H}}^{int} = \hat{\pi}\hat{\psi} - \hat{\mathcal{L}}^{int}$, dándonos de esta manera

$$\begin{aligned} \hat{\mathcal{H}}^{int} &= \frac{\hbar^2}{2m} \vec{\nabla}\hat{\psi}^* \cdot \vec{\nabla}\hat{\psi} + V\hat{\psi}^*\hat{\psi} \\ &+ \int d^3r' \hat{\psi}^*(\vec{r}', t)\hat{\psi}^*(\vec{r}, t)V'(\vec{r}', \vec{r}, t)\hat{\psi}(\vec{r}, t)\hat{\psi}(\vec{r}', t) \\ &= \hat{\mathcal{H}} + \hat{\mathcal{H}}', \end{aligned} \quad (6.46)$$

con

$$\hat{\mathcal{H}}' = \int d^3r' \hat{\psi}^*(\vec{r}', t)\hat{\psi}^*(\vec{r}, t)V'(\vec{r}', \vec{r}, t)\hat{\psi}(\vec{r}, t)\hat{\psi}(\vec{r}', t).$$

Integrando esta expresión obtenemos finalmente el Hamiltoniano del sistema el cual está dado por $\hat{H}^{int} = \hat{H} + \hat{H}'$ con \hat{H} el Hamiltoniano dado en la ecuación (6.9) y \hat{H}' dado por

$$\hat{H}' = \frac{1}{2} \int d^3r \int d^3r' \hat{\psi}^*(\vec{r}', t)\hat{\psi}^*(\vec{r}, t)V'(\vec{r}', \vec{r}, t)\hat{\psi}(\vec{r}, t)\hat{\psi}(\vec{r}', t), \quad (6.47)$$

donde el factor $1/2$ se ha incluido para evitar un doble conteo ya que el orden de la doble integral es ambiguo.

El paso siguiente es hacer una expansión de los operadores $\hat{\psi}^\dagger$ y $\hat{\psi}$ utilizando un conjunto completo de operadores \hat{a}_n^\dagger y \hat{a}_n , es decir, haciendo

$$\hat{\psi}(\vec{r}, t) = \sum_{n=0} \hat{a}_n \phi_n(\vec{r}, t), \quad \hat{\psi}(\vec{r}, t)^\dagger = \sum_{n=0} \hat{a}_n^\dagger \phi_n(\vec{r}, t)^*,$$

donde las ϕ_n son un conjunto completo de funciones ortonormales, autofunciones del operador asociado a una magnitud física cualquiera del espacio de representaciones de una partícula individual del campo.

De esta manera obtenemos:

$$\hat{H}^{int} = \hat{H} + \hat{H}' = \sum_{kl} \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_l H_{kl}^{(0)} + \frac{1}{2} \sum_{klmn} \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_l^\dagger \hat{a}_m \hat{a}_n (V')_{klmn}, \quad (6.48)$$

con $(H^{(0)})_{kl} = \int d^3r \phi_k^* H^{(0)} \phi_l$ el elemento matricial kl del Hamiltoniano de una partícula individual del campo y $(V')_{klmn}$ dado por la expresión

$$(V')_{klmn} = \int d^3r d^3r' \phi_k(\vec{r}', t)^* \phi_l(\vec{r}', t)^* V'(\vec{r}, \vec{r}') \phi_m(\vec{r}', t) \phi_n(\vec{r}', t). \quad (6.49)$$

Cuando se trabaja en la representación de la energía, el elemento matricial del Hamiltoniano de una partícula toma la forma $(H^{(0)})_{kl} = E_k^{(0)} \delta_{kl}$ de tal manera que el primer término de \hat{H}^{int} es de la forma $\sum_k \hat{n}_k E_k^{(0)}$ cuya forma simple nos sugiere que debemos trabajar en nuestros cálculos en la representación de la energía.

Finalmente queremos tomar el Hamiltoniano \hat{H}' como una perturbación del Hamiltoniano \hat{H} y utilizar la teoría de perturbaciones de Rayleigh-Schrödinger guardando solo los términos de primer orden en la perturbación. Es decir, queremos calcular

$$\begin{aligned} & \langle n_1, n_2, \dots, n_l, \dots | \hat{H}^{int} | n_1, n_2, \dots, n_l, \dots \rangle \\ &= \sum_k n_k E_k^{(0)} + \langle n_1, n_2, \dots, n_l, \dots | \hat{H}' | n_1, n_2, \dots, n_l, \dots \rangle, \end{aligned} \quad (6.50)$$

donde este último término toma la forma

$$\begin{aligned} & \langle n_1, n_2, \dots, n_l, \dots | \hat{H}' | n_1, n_2, \dots, n_l, \dots \rangle \\ &= \frac{1}{2} \sum_{klm} (V')_{klm} \langle n_1, n_2, \dots, n_l, \dots | \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_l^\dagger \hat{a}_n \hat{a}_m | n_1, n_2, \dots, n_l, \dots \rangle, \end{aligned} \quad (6.51)$$

de donde podemos notar que de las cuatro sumatorias infinitas van a sobrevivir solo aquellos términos para los cuales $m = k$, $n = l$ y $m = l$, $n = k$, con todos los demás términos iguales a cero debido a la descompesación que puede surgir entre operadores de creación y aniquilación. De esta manera podemos entonces escribir para nuestra perturbación en primer orden

$$\begin{aligned} & \langle n_1, n_2, \dots, n_l, \dots | \hat{H}' | n_1, n_2, \dots, n_l, \dots \rangle \\ &= \frac{1}{2} \sum_{kl} (V')_{klkl} \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_l^\dagger \hat{a}_k \hat{a}_l + \frac{1}{2} \sum_{kl} (V')_{kllk} \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_l^\dagger \hat{a}_l \hat{a}_k. \end{aligned}$$

El paso siguiente en el cálculo depende si estamos trabajando para un sistema de Bosones o para un sistema de fermions. Para el caso de Bosones se satisface que $\hat{a}_l^\dagger \hat{a}_k = \hat{a}_k \hat{a}_l^\dagger - \delta_{kl}$ mientras que para el caso de Fermiones la relación que debe usarse es $\hat{a}_l^\dagger \hat{a}_k = \delta_{kl} - \hat{a}_k \hat{a}_l^\dagger$, lo anterior debido a que los bosones satisfacen un álgebra de conmutadores, mientras que los Fermiones satisfacen un álgebra de anticonmutadores.

Para el caso particular de Bosones, las siguientes relaciones pueden ser usadas:

$$\begin{aligned} \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_l^\dagger \hat{a}_k \hat{a}_l &= \hat{a}_k^\dagger (\hat{a}_k \hat{a}_l^\dagger - \delta_{kl}) \hat{a}_l = \hat{n}_k \hat{n}_l - \hat{n}_k \delta_{kl} = \hat{n}_k (\hat{n}_l - \delta_{kl}). \\ \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_l^\dagger \hat{a}_l \hat{a}_k &= \hat{a}_k^\dagger \hat{n}_l \hat{a}_k = \hat{a}_k^\dagger (\hat{a}_k \hat{n}_l - \delta_{kl} \hat{a}_l) = \hat{n}_k \hat{n}_l - \hat{n}_k \delta_{kl} = \hat{n}_k (\hat{n}_l - \delta_{kl}). \end{aligned} \quad (6.52)$$

6.6 Quincuagésimo primera lección

En esta lección generalizaremos la formulación de la segunda cuantización para el caso en que nuestro campo esté constituido de Fermiones (partículas de espín semientero). El nuevo ingrediente que debemos tener en cuenta para este caso es el principio de exclusión de Pauli, el cual me prohíbe que dos Fermiones idénticos tengan todos sus números cuánticos iguales.

6.6.1 Relaciones de Jordan-Wigner

Como fué mostrado originalmente por Pascual Jordan y Eugene Wigner, el principio de exclusión de Pauli se incluye en el formalismo de la segunda cuantización, si en lugar de usar las reglas de conmutación canónicas (6.14) y (6.15) entre los operadores $\hat{\psi}$ y $\hat{\pi} \equiv i\hbar\hat{\psi}^\dagger$ se reemplazan estas por las nuevas reglas

$$\{\hat{\psi}(\vec{r}, t), \hat{\pi}(\vec{r}', t)\}_+ = i\hbar\delta^3(\vec{r} - \vec{r}'). \quad (6.53)$$

$$\{\hat{\psi}(\vec{r}, t), \hat{\psi}(\vec{r}', t)\}_+ = \{\hat{\pi}(\vec{r}, t), \hat{\pi}(\vec{r}', t)\}_+ = 0, \quad (6.54)$$

donde se ha definido el elemento matemático $\{\hat{A}, \hat{B}\}_+ \equiv \hat{A}\hat{B} + \hat{B}\hat{A}$, conocido en la literatura como el anticonmutador entre los operadores \hat{A} y \hat{B} , y donde de nuevo se ha hecho la cuantización a la distribución delta de Dirac $\delta^3(\vec{r} - \vec{r}')$ en lugar de hacerlo a la delta de Kronecker $\delta_{\vec{r}, \vec{r}'}$ por tratarse de grados continuos de libertad. Como $\hat{\pi} = i\hbar\hat{\psi}^\dagger$, la primera y la última de estas relaciones son equivalentes a

$$\{\hat{\psi}(\vec{r}, t), \hat{\psi}(\vec{r}', t)^\dagger\}_+ = \delta^3(\vec{r} - \vec{r}'); \quad (6.55)$$

$$\{\hat{\psi}(\vec{r}, t)^\dagger, \hat{\psi}(\vec{r}', t)^\dagger\}_+ = 0. \quad (6.56)$$

Las relaciones anteriores se conocen en la literatura como anticonmutadores en tiempos iguales, los que por postulado se deben satisfacer en todo instante de tiempo t . Una vez hecha la expansión de los operadores de campo en función del conjunto completo de operadores \hat{a}_l^\dagger y \hat{a}_l , es decir $\hat{\psi} = \sum \hat{a}_n \phi_n$ y $\hat{\psi}^\dagger = \sum \hat{a}_n^\dagger \phi_n^*$, la nueva álgebra que deberán de satisfacer estos operadores para el caso de fermiones será:

$$\{\hat{a}_n, \hat{a}_l^\dagger\}_+ = \hat{a}_n \hat{a}_l^\dagger + \hat{a}_l \hat{a}_n^\dagger = \delta_{nl}, \quad n, l = 0, 1, 2, \dots, \quad (6.57)$$

$$\{\hat{a}_n, \hat{a}_l\}_+ = \{\hat{a}_n^\dagger, \hat{a}_l^\dagger\}_+ = 0, \quad n, l = 0, 1, 2, \dots, \quad (6.58)$$

ecuaciones estas últimas conocidas en la literatura como las relaciones de Jordan-Wigner para Fermiones. Nótese que las dos ecuaciones en (6.58) las podemos escribir para el caso particular de $l = n$ como:

$$\hat{a}_n \hat{a}_n = \hat{a}_n^\dagger \hat{a}_n^\dagger = 0, \quad n = 0, 1, 2, \dots, \quad (6.59)$$

lo cual implica que el aplicar de manera iterada el operador \hat{a}_n o \hat{a}_n^\dagger da cero, relaciones estas que contienen un profundo significado físico como veremos a continuación.

6.6.2 Operadores número de ocupación

Al igual que para el caso de Bosones, definimos en este punto los operadores número de ocupación, o número de partículas como

$$\hat{n}_k \equiv \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_k, \quad (6.60)$$

y el operador número total de partículas como

$$\hat{N} = \sum_k \hat{n}_k. \quad (6.61)$$

Teorema 1

Para el caso de Fermiones, los operadores número de ocupación o número de partículas son idempotentes, es decir, satisfacen la relación $\hat{n}_k^2 = \hat{n}_k$.

La demostración de este teorema puede hacerse de manera inmediata haciendo uso de las relaciones de anticonmutación (6.57) y (6.58), las cuales implican que:

$$\hat{n}_k^2 = \hat{n}_k \hat{n}_k = \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_k \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_k = \hat{a}_k^\dagger (1 - \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_k) \hat{a}_k = \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_k - (\hat{a}_k^\dagger)^2 (\hat{a}_k)^2 = \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_k = \hat{n}_k,$$

Teorema 2

Los autovalores de \hat{n}_k , ; $k = 0, 1, 2, \dots$ pueden ser solamente cero y uno (lo cual es una propiedad de cualquier operador idempotente).

Para la demostración de este teorema comencemos por suponer que χ_k son las autofunciones del operador \hat{n}_k de autovalor n'_k . La idempotencia de los operadores nos permite realizar ahora el siguiente cálculo:

$$\begin{aligned} \hat{n}_k^2 \chi_k &= \hat{n}_k \hat{n}_k \chi_k = \hat{n}_k n'_k \chi_k = n'_k n'_k \chi_k = (n'_k)^2 \chi_k \\ &= \hat{n}_k \chi_k = n'_k \chi_k, \end{aligned}$$

de donde podemos concluir que $(n_k'^2 - n'_k) \chi_k = n'_k (n'_k - 1) \chi_k = 0$; es decir: $n'_k = 0$ ó $n'_k = 1$ como lo habíamos afirmado.

6.6.3 Propiedades de los operadores \hat{a}_l y \hat{a}_l^\dagger

Para el caso de los Bosones y haciendo uso de las reglas de conmutación (6.20) y (6.21) pudimos demostrar que los operadores \hat{a}_l y \hat{a}_l^\dagger se comportan como operadores de destrucción y creación respectivamente. Para el caso de los Fermiones, donde los operadores \hat{a}_l y \hat{a}_l^\dagger satisfacen las reglas de anticonmutación (6.57) y (6.58), en lugar de reglas de conmutación, es necesario mostrar que de nuevo estos operadores se comportan como operadores de aniquilación y de creación.

Comencemos por suponer que los autovectores de \hat{n}_l correspondientes a los autovalores 0 y 1 son respectivamente $|0'_l\rangle$ y $|1'_l\rangle$

De la relación $\hat{n}_l|0'_l\rangle = \hat{a}_l^\dagger\hat{a}_l|0'_l\rangle = 0|0'_l\rangle = 0$, podemos de manera consistente hacer la identificación $\hat{a}_l|0'_l\rangle = 0$. Haciendo ahora uso de las relaciones de anticonmutación de Jordan-Wigner, demostremos entonces que $|1'_l\rangle \equiv \hat{a}_l^\dagger|0'_l\rangle$ es el autovector de \hat{n}_l de autovalor +1.

$$\begin{aligned} \hat{n}_l(\hat{a}_l^\dagger|0'_l\rangle) &= (\hat{n}_l\hat{a}_l^\dagger)|0'_l\rangle = (\hat{a}_l^\dagger\hat{a}_l\hat{a}_l^\dagger)|0'_l\rangle = \hat{a}_l^\dagger(1 - \hat{a}_l^\dagger\hat{a}_l)|0'_l\rangle \\ &= [\hat{a}_l^\dagger - (\hat{a}_l^\dagger)^2\hat{a}_l]|0'_l\rangle = \hat{a}_l^\dagger|0'_l\rangle, \end{aligned}$$

donde se ha utilizado el hecho que $(\hat{a}_l^\dagger)^2 = 0$.

Procediendo de igual manera podemos demostrar a continuación que $\hat{a}_l|1'_l\rangle = |0'_l\rangle$. Efectivamente, de las relaciones de anticonmutación (6.57) y (6.58) para el caso de $n = l$; tenemos:

$$\hat{a}_l|1'_l\rangle = \hat{a}_l\hat{a}_l^\dagger|0'_l\rangle = (1 - \hat{a}_l^\dagger\hat{a}_l)|0'_l\rangle = |0'_l\rangle, \quad (6.62)$$

donde se ha utilizado el hecho que $\hat{a}_l|0'_l\rangle = 0$.

Hemos mostrado de esta manera que no hay ninguna inconsistencia en suponer que si existe el estado vacío para el estado l , es decir que si existe un $|0_l\rangle$ tal que $\hat{a}_l|0_l\rangle = 0$, tienen sentido las siguientes dos relaciones matemáticas:

- $\hat{a}_l^\dagger|0'_l\rangle = |1'_l\rangle$, autoestado de \hat{n}_l de autovalor +1.
- $\hat{a}_l|1'_l\rangle = |0'_l\rangle$, autoestado de \hat{n}_l de autovalor cero.

Esto me permiten identificar \hat{a}_l y \hat{a}_l^\dagger como operadores de destrucción y de creación respectivamente para el caso de Fermiones. Nótese que las dos relaciones anteriores están íntimamente relacionadas a la postulación de la existencia del estado vacío del campo de Fermiones, el cual se nota como

$$|\vec{0}\rangle = |0'_0, 0'_1, 0'_2, \dots, 0'_k, \dots\rangle \equiv |0'_0\rangle|0'_1\rangle|0'_2\rangle \dots |0'_k\rangle \dots,$$

el cual satisfacee $\hat{a}_l|\vec{0}\rangle = 0$ para $l = 0, 1, 2, \dots$.

6.6.4 Principio de exclusión de Pauli

De la discusión anterior podemos interpretar las ecuaciones en (6.59), que $(\hat{a}_l)^2 = (\hat{a}_l^\dagger)^2 = 0$ como que es imposible destruir o crear dos partículas en un mismo estado l , es decir, con todos sus números cuánticos iguales, lo cual no es más que una manera matemática de expresar el llamado principio de exclusión de Pauli. Así pues, las relaciones de anticonmutación de Jordan-Wigner para Fermiones tienen incluidas de manera implícita el principio de exclusión de Pauli.

6.6.5 Conjunto máximo de operadores

Calculemos ahora el conmutador $[\hat{n}_k, \hat{n}_l]$ de dos operadores de ocupación para el caso de los Fermiones. El álgebra nos enseña ahora que

$$\begin{aligned} [\hat{n}_k, \hat{n}_l] &= [\hat{a}_k^\dagger \hat{a}_k, \hat{a}_l^\dagger \hat{a}_l] = \hat{a}_k^\dagger [\hat{a}_k, \hat{a}_l^\dagger \hat{a}_l] + [\hat{a}_k^\dagger, \hat{a}_l^\dagger \hat{a}_l] \hat{a}_k \\ &= \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_l^\dagger \{\hat{a}_k, \hat{a}_l\} - \hat{a}_k^\dagger \{\hat{a}_k, \hat{a}_l^\dagger\} \hat{a}_l + \hat{a}_l^\dagger \{\hat{a}_k^\dagger, \hat{a}_l\} \hat{a}_k - \{\hat{a}_k^\dagger, \hat{a}_l^\dagger\} \hat{a}_l \hat{a}_k \\ &= -\hat{a}_k^\dagger \{\hat{a}_k, \hat{a}_l^\dagger\} \hat{a}_l + \hat{a}_l^\dagger \{\hat{a}_k^\dagger, \hat{a}_l\} \hat{a}_k = \delta_{kl} (-\hat{a}_k^\dagger \hat{a}_l + \hat{a}_l^\dagger \hat{a}_k) = 0; \end{aligned} \quad (6.63)$$

es decir, los operadores \hat{n}_k y \hat{n}_l , $k, l = 0, 1, 2, \dots$, conmutan todos entre sí y podemos hallar autovectores simultáneos del siguiente conjunto infinito máximo de operadores

$$\{\hat{n}_0, \hat{n}_1, \hat{n}_2, \dots, \hat{n}_k, \dots\},$$

los cuales podemos escribir de la siguiente manera

$$|n'_0, n'_1, n'_2, \dots, n'_k, \dots\rangle \equiv (\hat{a}_0^\dagger)^{n'_0} (\hat{a}_1^\dagger)^{n'_1} (\hat{a}_2^\dagger)^{n'_2} \dots (\hat{a}_k^\dagger)^{n'_k} \dots |\vec{0}\rangle, \quad (6.64)$$

donde $n'_k = 0, 1$ solamente. En la definición anterior hemos ordenado los operadores de creación de manera ascendente, lo cual tiene implícita la convención de fase que estamos usando para este caso de Fermiones.

De igual manera y haciendo uso de los resultados anteriores podemos demostrar que el operador número total de partículas \hat{N} conmuta con todos y cada uno de los operadores número de ocupación \hat{n}_l . Es decir:

$$[\hat{N}, \hat{n}_l] = \left[\sum_{k=0}^{\infty} \hat{n}_k, \hat{n}_l \right] = \sum_{k=0}^{\infty} [\hat{n}_k, \hat{n}_l] = 0, \quad (6.65)$$

lo cual quiere decir que el conjunto completo de autovectores en (6.64) son también autovectores de \hat{N} , con autovalor $\sum_k n'_k$, como debieran serlo. De igual manera podemos probar que este conjunto completo de autovectores son también autovectores del Hamiltoniano del sistema físico cuando este se escribe en la representación de la energía, es decir, en la forma $\hat{H} = \sum_k \hat{n}_k E_k^{(0)}$, ya que $[\hat{n}_k, \hat{H}] = [\hat{N}, \hat{H}] = 0$.

Problemas

1: Para el Hamiltoniano del campo en la representación de la energía $\hat{H} = \sum_k \hat{n}_k E_k^{(0)}$, muestre que el conmutador $[\hat{n}_k, \hat{H}]$ es cero. Haga la demostración tanto para el caso de Bosones como para el caso de Fermiones.

2: Muestre que $\langle \Phi(\vec{r}_1, t) | \Phi(\vec{r}_2, \vec{r}_3, t) \rangle = 0$, para representaciones de Fock de campos o bien Bosónicos o bien Fermiónicos.

3: Calcule el valor de $\langle \Phi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, t) | \Phi(\vec{r}'_1, \vec{r}'_2, t) \rangle$, tanto para el caso de Bosones como para el caso de Fermiones.

4: En la representación número de partículas, halle los elementos matriciales diferentes de cero para los operadores \hat{a}_l^\dagger y \hat{a}_l . Haga el cálculo tanto para Bosones como para Fermiones.

5: Para Bosones, calcule $\langle \Phi(\vec{r}_1, t) | \hat{a}_l | \Phi(\vec{r}_2, \vec{r}_3, t) \rangle = 0$.

6: Haciendo uso de la ecuación de movimiento para los campos cuánticos $\dot{\hat{O}} = -i[\hat{O}, \hat{H}]/\hbar$ [ecuación (6.27)], halle para el caso de Fermiones $\dot{\hat{\psi}}$ y $\dot{\hat{N}}$.

