Estructura de la Materia 2 - Verano de 2026

Guía 8: Sistemas de muchos cuerpos con interacción.

1. **Álgebra de segunda cuantización (fermiones)**

Consideremos estados de 1-fermión (modos fermiónicos o espín-orbitales) etiquetados como $i = 1, \ldots, M$; por ejemplo, $i \equiv (\mathbf{r}, \sigma)$ o $i \equiv (\mathbf{k}, \sigma)$. Los operadores de creación $\hat{c}_i^\dagger$ y aniquilación $\hat{c}_i$ satisfacen las relaciones canónicas de anticonmutación:

$$\{\hat{c}_i, \hat{c}_j^\dagger\} = \delta_{ij}, \qquad \{\hat{c}_i, \hat{c}_j\} = 0, \qquad \{\hat{c}_i^\dagger, \hat{c}_j^\dagger\} = 0.$$

Definimos los estados de Fock en la base de número de ocupación como el producto ordenado

$$|n_1 \cdots n_M\rangle \equiv \left(\hat{c}_1^\dagger\right)^{n_1} \cdots \left(\hat{c}_M^\dagger\right)^{n_M} |0\rangle\,, \qquad n_i \in \{0, 1\}.$$

Si $\{i_1 < \cdots < i_N\}$ son los modos ocupados (aquellos con $n_{i_\alpha} = 1$), entonces

$$|n_1 \cdots n_M\rangle = \hat{c}_{i_1}^\dagger \cdots \hat{c}_{i_N}^\dagger |0\rangle\,,$$

y su función de onda en 1ra cuantización es el determinante de Slater construido a partir de los espín-orbitales de un cuerpo asociadas a esos modos. El vacío cumple $\hat{c}_i |0\rangle = 0$ para todo i.

Estudie las siguientes propiedades:

a) **Exclusión de Pauli.** Verifique que se satisface el principio de exclusión de Pauli $(\hat{c}_i^\dagger)^2 = 0$ y concluya que n_i sólo puede tomar los valores 0 o 1.

b) **Signo fermiónico.** Demuestre que

$$\begin{aligned}\hat{c}_p^\dagger |n_1 \cdots n_p \cdots n_M\rangle &= (1 - n_p)\,(-1)^{N_{<p}}\; |n_1 \cdots (n_p + 1) \cdots n_M\rangle\,,\\ \hat{c}_p |n_1 \cdots n_p \cdots n_M\rangle &= n_p\,(-1)^{N_{<p}}\; |n_1 \cdots (n_p - 1) \cdots n_M\rangle\,,\end{aligned}$$

donde $N_{<p} = \sum_{j<p} n_j$ es el número de permutaciones fermiónicas necesarias para llevar $\hat{c}_p^{(\dagger)}$ hasta su posición en el producto ordenado; es decir, el número de modos ocupados a la izquierda del modo p-ésimo.

c) **Operador número.** Defina $\hat{n}_i \equiv \hat{c}_i^\dagger \hat{c}_i$ y pruebe:

$$\hat{n}_i |n_1 \cdots n_M\rangle = n_i\, |n_1 \cdots n_M\rangle\,, \qquad \hat{n}_i^2 = \hat{n}_i, \qquad [\hat{n}_i, \hat{c}_j^\dagger] = \delta_{ij}\, \hat{c}_j^\dagger, \qquad [\hat{n}_i, \hat{c}_j] = -\delta_{ij}\, \hat{c}_j.$$

d) **Número total.** Para $\hat{N} = \sum_{i=1}^{M} \hat{n}_i$, verifique

$$[\hat{N}, \hat{c}_j^\dagger] = \hat{c}_j^\dagger, \qquad [\hat{N}, \hat{c}_j] = -\hat{c}_j,$$

y concluya cómo cambia el número total de partículas al aplicar $\hat{c}_j^\dagger$ o $\hat{c}_j$.

2. **(Opcional) Relación entre primera y segunda cuantización**

   Defina el operador de campo

$$\hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{k}} \phi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})\, \hat{c}^\dagger_{\mathbf{k}}, \qquad \phi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \langle \mathbf{r}|\mathbf{k}\rangle\,,$$

   y la función de onda de dos partículas como

$$\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \equiv \langle 0|\, \hat{\psi}(\mathbf{r}_2)\hat{\psi}(\mathbf{r}_1)\, |\Psi\rangle\,.$$

   Para el estado $|\Psi\rangle = \hat{c}^\dagger_{\mathbf{k}_1}\hat{c}^\dagger_{\mathbf{k}_2}\,|0\rangle$, muestre que

$$\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \frac{1}{\sqrt{2}}\Big(\phi_{\mathbf{k}_1}(\mathbf{r}_1)\phi_{\mathbf{k}_2}(\mathbf{r}_2) - \phi_{\mathbf{k}_2}(\mathbf{r}_1)\phi_{\mathbf{k}_1}(\mathbf{r}_2)\Big),$$

   y concluya que $\Psi(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1) = -\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$.

3. **(Opcional) Operadores de espín en segunda cuantización**

   En primera cuantización, para un grado de libertad de espín 1/2, los operadores de espín son

$$\mathbf{s} = \frac{\hbar}{2}\boldsymbol{\sigma}, \qquad \boldsymbol{\sigma} = (\sigma^x, \sigma^y, \sigma^z),$$

   donde σ^a son las matrices de Pauli en la base $\{|\uparrow\rangle\,, |\downarrow\rangle\}$.

   En segunda cuantización, el operador de espín (para un único modo orbital) se define como

$$\hat{\mathbf{s}} = \frac{\hbar}{2} \sum_{\mu,\mu'=\uparrow,\downarrow} \hat{c}^\dagger_\mu\, \boldsymbol{\sigma}_{\mu\mu'}\, \hat{c}_{\mu'}.$$

   En particular, las componentes se escriben como

$$\hat{s}^x = \frac{\hbar}{2}\Big(\hat{c}^\dagger_\uparrow\hat{c}_\downarrow + \hat{c}^\dagger_\downarrow\hat{c}_\uparrow\Big)\,, \qquad \hat{s}^y = \frac{\hbar}{2i}\Big(\hat{c}^\dagger_\uparrow\hat{c}_\downarrow - \hat{c}^\dagger_\downarrow\hat{c}_\uparrow\Big)\,, \qquad \hat{s}^z = \frac{\hbar}{2}\Big(\hat{c}^\dagger_\uparrow\hat{c}_\uparrow - \hat{c}^\dagger_\downarrow\hat{c}_\downarrow\Big)\,.$$

   a) Usando las relaciones de anticonmutación, verifique que

$$[\hat{s}^z, \hat{s}^\pm] = \pm\hbar\, \hat{s}^\pm, \qquad [\hat{s}^+, \hat{s}^-] = 2\hbar\, \hat{s}^z,$$

   donde $\hat{s}^\pm$ los operadores escalera

$$\hat{s}^+ \equiv \hat{c}^\dagger_\uparrow\hat{c}_\downarrow, \qquad \hat{s}^- \equiv \hat{c}^\dagger_\downarrow\hat{c}_\uparrow.$$

   En base a lo anterior, concluya que los operadores de espín satisfacen el álgebra de Lie $\mathfrak{su}(2)$:

$$[\hat{s}^a, \hat{s}^b] = i\hbar\, \varepsilon_{abc}\, \hat{s}^c.$$

   b) Muestre que el operador número total $\hat{n} = \hat{n}_\uparrow + \hat{n}_\downarrow$ conmuta con el espín:

$$[\hat{n}, \hat{s}^a] = 0 \qquad (a = x, y, z).$$

Interprete físicamente este resultado.

c) Evalúe $\hat{\mathbf{s}}^2$ y verifique que en el subespacio de ocupación simple ($\hat{n} = 1$) se obtiene $\hat{\mathbf{s}}^2 = \frac{3}{4}\hbar^2$, mientras que para $\hat{n} = 0$ y $\hat{n} = 2$ se obtiene $\hat{\mathbf{s}}^2 = 0$.

4. **Sistemas de muchos cuerpos (*many-body*)**

Considere un sistema con M estados de 1–fermión (modos o espín-orbitales) y estados de N–fermiones antisimetrizados (determinantes de Slater) en la base de número de ocupación:

$$|\chi\rangle = |n_1 \cdots n_M\rangle\,, \qquad n_i \in \{0,1\}, \qquad \sum_{i=1}^{M} n_i = N.$$

a) **Dimensión del espacio de Fock.**

Sea $\mathcal{H}_N$ el subespacio con número de partículas fijo N y sea $\mathcal{F} = \bigoplus_{N=0}^{M} \mathcal{H}_N$ el espacio de Fock completo. Muestre que

$$\dim \mathcal{H}_N = \binom{M}{N}, \qquad \dim \mathcal{F} = \sum_{N=0}^{M} \binom{M}{N} = 2^M,$$

y concluya que la dimensión del espacio de Hilbert crece exponencialmente con M.

b) **Caso no interactuante: reducción a 1-partícula.**

Considere un Hamiltoniano de enlaces fuertes (*tight-binding*) no interactuante:

$$\hat{H}_0 = \sum_{i,j=1}^{M} t_{ij}\, \hat{c}_i^\dagger \hat{c}_j, \qquad t_{ij} = t_{ji}^*.$$

En un cristal traslacionalmente invariante suele emplearse una base local $i \equiv (\mathbf{R}, p)$, donde $\mathbf{R}$ es un sitio de la red directa y p denota grados de libertad internos (orbital, subred y/o espín). En ese caso, los autoestados de 1–partícula pueden elegirse en la base de Bloch, etiquetada por $\alpha \equiv (\mathbf{k}, \nu)$, donde $\mathbf{k}$ es el cuasimomento (en la primera zona de Brillouin) y ν el índice de banda.

Sea $u_{i\alpha}$ un autovector de la matriz t,

$$\sum_j t_{ij} u_{j\alpha} = \varepsilon_\alpha\, u_{i\alpha},$$

y defina los operadores en la base diagonal

$$\hat{d}_\alpha^\dagger = \sum_i u_{i\alpha} \hat{c}_i^\dagger, \qquad \hat{d}_\alpha = \sum_i u_{i\alpha}^* \hat{c}_i.$$

1) Muestre que

$$\hat{H}_0 = \sum_{\alpha=1}^{M} \varepsilon_\alpha\, \hat{d}_\alpha^\dagger \hat{d}_\alpha.$$

2) Para número total fijo N, describa cómo construir el estado fundamental y su energía

en términos de ε_α.

3) Explique por qué aquí el problema se reduce a diagonalizar una matriz $M \times M$ (problema de 1–partícula), aun cuando $\dim \mathcal{F} = 2^M$.

c) **Caso interactuante: no hay reducción a 1-partícula.**

Considere ahora un Hamiltoniano con interacción local (Hubbard como ejemplo):

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + U \sum_i \hat{n}_{i\uparrow} \hat{n}_{i\downarrow}.$$

Explique brevemente por qué el término de interacción (cuártico en operadores) impide, en general, llevar $\hat{H}$ a una forma diagonal $\sum_\alpha \tilde{\varepsilon}_\alpha \, \hat{d}^\dagger_\alpha \hat{d}_\alpha$ mediante un cambio unitario en el espacio de 1-partícula.

d) **Escalamiento (barrera) exponencial.**

Argumente por qué, en general, resolver el problema interactuante en forma exacta requiere trabajar en un espacio de Hilbert de dimensión exponencial (2^M). Mencione o investigue qué estrategias o métodos aproximados se utilizan para abordar este problema, evitando la diagonalización exacta.

5. **Modelo de Hubbard (un sitio).**

Para ganar intuición en la física del modelo de Hubbard, considere un único sitio:

$$\hat{H} = U \, \hat{n}_\uparrow \hat{n}_\downarrow, \qquad \hat{N} = \hat{n}_\uparrow + \hat{n}_\downarrow, \qquad \beta \equiv 1/T \ (k_B \equiv 1).$$

Los autoestados de $\hat{H}$ son $\{|\alpha\rangle\} = \{|0\rangle, |\uparrow\rangle, |\downarrow\rangle, |\uparrow\downarrow\rangle\}$ con energías $\{E_{|\alpha\rangle}\} = \{0, 0, 0, U\}$

a) Obtenga una expresión para la ocupación y la energía interna en el ensamble gran canónico

$$\rho \equiv \langle \hat{N} \rangle = \frac{1}{Z} \sum_\alpha \langle\alpha| \, \hat{N} \, e^{-\beta(\hat{H} - \mu\hat{N})} \, |\alpha\rangle, \qquad (0 \le \rho \le 2),$$

$$E \equiv \langle \hat{H} \rangle = \frac{1}{Z} \sum_\alpha \langle\alpha| \, \hat{H} \, e^{-\beta(\hat{H} - \mu\hat{N})} \, |\alpha\rangle,$$

$$Z \equiv \mathrm{Tr}\, e^{-\beta(\hat{H} - \mu\hat{N})} = \sum_\alpha \langle\alpha| \, e^{-\beta(\hat{H} - \mu\hat{N})} \, |\alpha\rangle.$$

b) Grafique la ocupación $\rho(\mu) = \langle \hat{N} \rangle$ para $U = 4$ y varias temperaturas $0 < T \le 1$.

1) Señale si aparecen *plateaus* (regiones donde la compresibilidad $\partial\rho/\partial\mu$ es pequeña).

2) Identifique los valores de μ donde cambia la ocupación ($0 \to 1$ y $1 \to 2$).

3) Discuta la idea de un *gap de carga atómico* (precursor de un "aislante de Mott").

c) Calcule y grafique el calor específico

$$C(\mu, T) \equiv \frac{\partial \langle \hat{H} \rangle}{\partial T},$$

en función de T a valores de μ fijos, por ejemplo, un valor que produzca $\rho \simeq 1$.

d) Pruebe que el momento magnético local puede reescribirse como

$$\langle m^2 \rangle \equiv \left\langle (\hat{n}_\uparrow - \hat{n}_\downarrow)^2 \right\rangle = \rho - 2d, \qquad d \equiv \langle \hat{n}_\uparrow \hat{n}_\downarrow \rangle.$$

e) Considere el sistema a mitad de llenado (ajuste μ para que $\rho = 1$):

1) Grafique $\langle m^2 \rangle$ en función de U para $T = 2$ y explique por qué $\langle m^2 \rangle \to 1$ cuando $U \gg T$.

2) Grafique $\langle m^2 \rangle$ en función de T para $U = 4$ y explique por qué $\langle m^2 \rangle \to 1/2$ si $T \gg U$.

6. **Modelo de Hubbard (dos sitios)**

Considere el Hamiltoniano de Hubbard

$$\hat{H} = -t \sum_{\langle ij \rangle, \sigma} \left(\hat{c}^\dagger_{i\sigma} \hat{c}_{j\sigma} + \hat{c}^\dagger_{j\sigma} \hat{c}_{i\sigma} \right) + U \sum_i \hat{n}_{i\uparrow} \hat{n}_{i\downarrow}, \qquad \hat{n}_{i\sigma} \equiv \hat{c}^\dagger_{i\sigma} \hat{c}_{i\sigma}.$$

Estudie el caso de un dímero (dos sitios $i = 1, 2$) en la base de número de ocupación:

$$|n_{1\uparrow}\, n_{1\downarrow}\, n_{2\uparrow}\, n_{2\downarrow} \rangle\,, \qquad n_{i\sigma} \in \{0, 1\},$$

a) **Simetrías.** Demuestre que el Hamiltoniano de Hubbard conmuta con

$$\hat{N}_\uparrow = \sum_i \hat{n}_{i\uparrow}, \qquad \hat{N}_\downarrow = \sum_i \hat{n}_{i\downarrow}, \qquad \hat{S}^z = \frac{\hbar}{2} \sum_i (\hat{n}_{i\uparrow} - \hat{n}_{i\downarrow}),$$

y con los siguientes operadores de espín total (simetría SU(2) de espín):

$$\hat{S}^+ = \sum_i \hat{c}^\dagger_{i\uparrow} \hat{c}_{i\downarrow}, \qquad \hat{S}^- = \sum_i \hat{c}^\dagger_{i\downarrow} \hat{c}_{i\uparrow}, \qquad \hat{\mathbf{S}}^2 = (\hat{S}^z)^2 + \frac{1}{2}(\hat{S}^+ \hat{S}^- + \hat{S}^- \hat{S}^+).$$

b) **Diagonalización por bloques.** Calcule autoestados y autoenergías del dímero explotando las simetrías anteriores; es decir, ordenando la base por bloques $(N_\uparrow, N_\downarrow)$ o (N, S^z).

c) **Sector de dos partículas.**

1) Identifique los bloques $(N_\uparrow, N_\downarrow)$ del sector $N = 2$ y el valor de S^z en cada uno.

2) Compare la energía del estado fundamental ($S^z = 0$) con la de los bloques con $S^z = \pm 1$.

3) Analice el límite $U \gg t$: describa cualitativamente la estructura de la función de onda del estado fundamental y el rol de la doble ocupación.