Hochschule RheinMain
Prof. Dr. D. Lehmann SS 2023

Lösungen 10. Übungsblatt
Mathematische Methoden in der Quantenmechanik

Erinnern wir uns zunächst noch einmal an das Theorem 9.1:

Theorem 9.1: Es sei $\{e_\alpha\}_{\alpha=1}^{|\Gamma|}$ eine ONB von $L^2(\Gamma)$. Gegeben seien die Einteilchen- und Zweiteilchen-Operatoren

$$h \;:\; L^2(\Gamma) \;\to\; L^2(\Gamma) \tag{1}$$

$$v \;:\; L^2(\Gamma^2) \;\to\; L^2(\Gamma^2) \tag{2}$$

Wir definieren den n-Teilchen-Operator

$$H_n \;=\; \sum_{i=1}^n h_i \;+\; \tfrac{1}{2} \sum_{\substack{i,j=1 \\ i\neq j}}^n v_{ij} \;:\; L^2(\Gamma^n) \;\to\; L^2(\Gamma^n) \tag{3}$$

mit der kinetischen Energie h_i für das i-te Teilchen und der Wechselwirkungsenergie v_{ij} zwischen dem i-ten und j-ten Teilchen gegeben durch

$$(h_i f_n)(x_1,\cdots,x_n) \;=\; \sum_{\alpha,\beta}\sum_{y_i\in\Gamma} e_\beta(x_i)\,\langle\beta|h|\alpha\rangle\,\bar e_\alpha(y_i)\,f_n(x_1,\cdots,y_i,\cdots,x_n) \tag{4}$$

$$(v_{ij} f_n)(x_1,\cdots,x_n) \;= \tag{5}$$

$$\sum_{\alpha\beta\gamma\delta}\sum_{y_i,y_j} e_\gamma(x_i)\,e_\delta(x_j)\,\langle\gamma,\delta|v|\alpha,\beta\rangle\,\bar e_\alpha(y_i)\,\bar e_\beta(y_j)\,f_n(x_1,\cdots y_i\cdots y_j\cdots x_n)$$

mit den Matrix-Elementen

$$\langle\beta|h|\alpha\rangle \;:=\; (e_\beta, he_\alpha) \tag{6}$$

$$\langle\gamma,\delta|v|\alpha,\beta\rangle \;:=\; (\,e_\gamma\otimes e_\delta\,,\;v\,e_\alpha\otimes e_\beta\,) \tag{7}$$

Die bosonischen und fermionischen Vielteilchen-Operatoren H_n^s und H_n^a sind gegeben durch die Einschränkung von H_n auf die Menge der symmetrischen oder antisymmetrischen Wellenfunktionen,

$$H_n^s \;:=\; H_n\Big|_{L_s^2(\Gamma^n)} \tag{8}$$

$$H_n^a \;:=\; H_n\Big|_{L_a^2(\Gamma^n)} \tag{9}$$

Dann gelten die folgenden Darstellungen:

$$H_n^s \;=\; \sum_{\alpha,\beta} a_\beta^+ \,\langle\beta|h|\alpha\rangle\, a_\alpha \;+\; \tfrac{1}{2}\sum_{\alpha\beta\gamma\delta} a_\gamma^+ a_\delta^+ \,\langle\gamma,\delta|v|\alpha,\beta\rangle\, a_\beta a_\alpha \tag{10}$$

$$H_n^a \;=\; \sum_{\alpha,\beta} c_\beta^+ \,\langle\beta|h|\alpha\rangle\, c_\alpha \;+\; \tfrac{1}{2}\sum_{\alpha\beta\gamma\delta} c_\gamma^+ c_\delta^+ \,\langle\gamma,\delta|v|\alpha,\beta\rangle\, c_\beta c_\alpha \tag{11}$$

mit den bosonischen und fermionischen Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren aus der Definition 8.1.

Aufgabe 1: Impulsraum-Darstellung, Bosonen, ohne Spin

Der Hamilton-Operator ist gegeben durch

$$H_n \;=\; -\tfrac{\hbar^2}{2m}\sum_{i=1}^{n}\Delta_{x_i}^\Gamma \;+\; \tfrac{1}{2}\sum_{\substack{i,j=1\\ i\neq j}}^{n} V(x_i - x_j) \tag{12}$$

mit

$$\Gamma \;:=\; \Gamma_x \;=\; [-L,+L]_{\Delta x}^d \tag{13}$$

der mit positivem Gitterabstand Δx diskretisierte Würfel mit Kantenlänge $2L$ und Δ^Γ der diskrete Laplace-Operator auf Γ_x. Als Ein-Teilchen Basis von $L^2(\Gamma)$ wählen wir die Eigenfunktionen vom diskreten Laplace-Operator, die hatten wir im week2 und week3 berechnet, im Theorem 2.2:

$$B \;=\; \Big\{\, e_k : \Gamma_x \to \mathbb{C} \;\Big|\; x \to e_k(x) \,=\, \tfrac{1}{|\Gamma_x|^{1/2}}\, e^{ikx}\,,\;\; k \,\in\, \Gamma_k \,\Big\} \tag{14}$$

Die Eigenwerte waren gegeben durch

$$-\tfrac{\hbar^2}{2m}\,\Delta^\Gamma e_k \;=\; \tfrac{\hbar^2}{2m}\sum_{i=1}^d \Big[\tfrac{\sin(k_i\Delta x)}{\Delta x}\Big]^2 e_k \;=\; \varepsilon_k\, e_k \tag{15}$$

so dass

$$\langle p|h|k\rangle \;=\; \varepsilon_k\,(e_p, e_k) \;=\; \varepsilon_k\,\delta_{p,k} \tag{16}$$

Berechnen wir jetzt das Matrix-Element

$$\langle\gamma,\delta|v|\alpha,\beta\rangle \;:=\; (\, e_\gamma\otimes e_\delta\,,\; v\, e_\alpha\otimes e_\beta\,) \tag{17}$$

mit

$$(vf_2)(x,y) \;=\; V(x-y)\, f_2(x,y) \tag{18}$$

Die Indizes $\alpha,\beta,\gamma,\delta$ für die Basisvektoren sind jetzt also Vektoren im Impulsraum, sagen wir

$$(\alpha,\beta,\gamma,\delta) \;=\; (k_1,k_2,k_3,k_4) \;\in\; \Gamma_k^4 \tag{19}$$

Wir bekommen dann

$$\langle k_3,k_4|v|k_1,k_2\rangle \;:=\; (\, e_{k_3}\otimes e_{k_4}\,,\; v\; e_{k_1}\otimes e_{k_2}\,) \tag{20}$$
$$= \sum_{y_1,y_2} \overline{e_{k_3}(y_1)e_{k_4}(y_2)}\;[\,v\,(e_{k_1}\otimes e_{k_2})](y_1,y_2)$$
$$= \sum_{y_1,y_2} \bar e_{k_3}(y_1)\bar e_{k_4}(y_2)\; V(y_1-y_2)\, e_{k_1}(y_1)e_{k_2}(y_2)$$
$$= \tfrac{1}{|\Gamma_x|^2}\;\textstyle\sum_{y_1,y_2}\; e^{-\,ik_3y_1}\, e^{-\,ik_4y_2}\; V(y_1-y_2)\, e^{+\,ik_1y_1}\, e^{+\,ik_2y_2}$$
$$= \tfrac{1}{|\Gamma_x|^2}\;\textstyle\sum_{y_1,y_2}\; e^{-\,ik_3(y_1-y_2)}\, e^{-\,i(k_3+k_4)y_2}\; V(y_1-y_2)\, e^{+\,ik_1(y_1-y_2)}\, e^{+\,i(k_1+k_2)y_2}$$

oder

$$\langle k_3,k_4|v|k_1,k_2\rangle \;=\; \tfrac{1}{|\Gamma_x|^2}\;\textstyle\sum_{y_2}\; e^{+\,i(k_1+k_2-k_3-k_4)y_2}\;\sum_{y_1}\; V(y_1-y_2)\, e^{+\,i(k_1-k_3)(y_1-y_2)} \tag{21}$$

Für grosse Volumina $L\to\infty$ können wir in der zweiten Summe y_1-y_2 durch ein x substituieren und dann insbesondere über den ganzen Raum laufen lassen, so dass die Summe unabhängig ist von y_2. Also

$$\sum_{y_1} V(y_1-y_2)\, e^{+\,i(k_1-k_3)(y_1-y_2)} \;\approx\; \sum_x V(x)\, e^{+\,i(k_1-k_3)x}$$
$$=:\; \tfrac{1}{(\Delta x)^d}\;\hat V(k_1-k_3) \tag{22}$$

mit

$$\hat V(k_1-k_3) \;:=\; \sum_{x\in\Gamma_x} (\Delta x)^d\; V(x)\, e^{+\,i(k_1-k_3)x}$$
$$\overset{V(-x)=V(x)}{=}\; \sum_{x\in\Gamma_x} (\Delta x)^d\, V(x)\, e^{-\,i(k_1-k_3)x} \;=\; \hat V(k_3-k_1) \tag{23}$$

Für die y_2-Summe ergibt sich dann

$$\sum_{y_2} e^{+\,i(k_1+k_2-k_3-k_4)y_2} \;=\; |\Gamma_x|\;\times\;\delta_{k_1+k_2-k_3-k_4\,,\,0} \;=\; |\Gamma_x|\;\times\;\delta_{k_1+k_2\,,\,k_3+k_4} \tag{24}$$

Damit bekommen wir

$$\langle k_3,k_4|v|k_1,k_2\rangle \;=\; \tfrac{1}{|\Gamma_x|^2}\,|\Gamma_x|\;\times\;\delta_{k_1+k_2\,,\,k_3+k_4}\;\times\;\tfrac{1}{(\Delta x)^d}\;\hat V(k_1-k_3)$$
$$= \tfrac{(\Delta x)^d(\Delta k)^d}{(2\pi)^d}\;\times\;\delta_{k_1+k_2\,,\,k_3+k_4}\;\times\;\tfrac{1}{(\Delta x)^d}\;\hat V(k_1-k_3)$$
$$= \tfrac{(\Delta k)^d}{(2\pi)^d}\;\times\;\delta_{k_1+k_2\,,\,k_3+k_4}\;\times\;\hat V(k_1-k_3) \tag{25}$$

und wir erhalten die Darstellung

$$H_n^s \;=\; \sum_{k,p} a_p^+\,\langle p|h|k\rangle\; a_k \;+\; \tfrac12 \sum_{k_1k_2k_3k_4} a_{k_3}^+a_{k_4}^+\,\langle k_3,k_4|v|k_1,k_2\rangle\; a_{k_2}a_{k_1}$$
$$= \sum_k \varepsilon_k\; a_k^+a_k \;+\; \tfrac12 \sum_{k_1k_2k_3k_4} \tfrac{(\Delta k)^d}{(2\pi)^d}\;\delta_{k_1+k_2\,,\,k_3+k_4}\; a_{k_3}^+a_{k_4}^+\;\hat V(k_1-k_3)\; a_{k_2}a_{k_1} \tag{26}$$

Setzen wir noch

$$V(x) \;=\; 2u\,\tfrac{\delta_{x,0}}{(\Delta x)^d} \tag{27}$$

bekommen wir $\hat{V}(k_1-k_3)=2u$ und damit

$$H_n^s \;=\; \sum_k \varepsilon_k\, a_k^+ a_k \;+\; u \sum_{k_1k_2k_3k_4} \tfrac{(\Delta k)^d}{(2\pi)^d}\,\delta_{k_1+k_2\,,\,k_3+k_4}\; a_{k_3}^+ a_{k_4}^+\, a_{k_2} a_{k_1} \tag{28}$$

Aufgabe 2: Impulsraum-Darstellung, Fermionen, Spin 1/2

Der Hamilton-Operator ist wieder gegeben durch

$$H_n \;=\; -\tfrac{\hbar^2}{2m}\sum_{i=1}^n \Delta_{x_i}^{\Gamma_x} \;+\; \tfrac{1}{2}\sum_{\substack{i,j=1\\ i\neq j}}^n V(x_i-x_j) \tag{29}$$

das ist also derselbe Ausdruck wie im bosonischen Fall. Für Elektronen müssen wir aber noch den Spin-Freiheitsgrad mit berücksichtigen, der Hamilton-Operator ist Spin-unabhängig, aber die Wellenfunktionen sind nicht einfach skalare Funktionen auf dem Ortsraum-Gitter

$$\Gamma_x \;=\; [-L,+L]^d_{\Delta x} \tag{30}$$

sondern es sind 2-komponentige Grössen mit einer Spin-up und einer Spin-down Komponente. Das heisst, eine Einteilchen-Wellenfunktion für ein Elektron ist ein Element von $L^2(\Gamma)$ mit

$$\Gamma \;:=\; \Gamma_x\times\{\uparrow,\downarrow\} \;=\; [-L,+L]^d_{\Delta x}\;\times\;\{\uparrow,\downarrow\} \tag{31}$$

Wir wählen die folgende Ein-Teilchen Basis von $L^2(\Gamma)$:

$$B \;=\; \Big\{\, e_{k\sigma} \;=\; e_{k\sigma}(x\tau) \;:=\; e_k(x)\,\delta_{\sigma,\tau} \,:\, \Gamma_x\times\{\uparrow,\downarrow\}\to\mathbb{C} \;\Big|\; (k,\sigma)\in\Gamma_k\times\{\uparrow,\downarrow\} \,\Big\} \tag{32}$$

Berechnen wir wieder das Matrix-Element

$$\langle\gamma,\delta|v|\alpha,\beta\rangle \;:=\; (\, e_\gamma\otimes e_\delta\,,\; v\, e_\alpha\otimes e_\beta\,) \tag{33}$$

mit

$$(vf_2)(x\sigma,y\tau) \;=\; V(x-y)\, f_2(x\sigma,y\tau) \tag{34}$$

die Wechselwirkung ist also Spin-unabhängig. Die Indizes $\alpha,\beta,\gamma,\delta$ für die Basisvektoren sind jetzt also (Impulsraum,Spin)-Paare, sagen wir

$$(\alpha,\beta,\gamma,\delta) \;=\; (k_1\sigma_1,k_2\sigma_2,k_3\sigma_3,k_4\sigma_4) \tag{35}$$

und wir bekommen dann

$$\begin{aligned}
\langle k_3\sigma_3, k_4\sigma_4|v|k_1\sigma_1, k_2\sigma_2\rangle \;&:=\; (\, e_{k_3\sigma_3}\otimes e_{k_4\sigma_4}\,,\, v\; e_{k_1\sigma_1}\otimes e_{k_2\sigma_2}\,) \\
&= \sum_{y_1\tau_1, y_2\tau_2} \overline{e_{k_3\sigma_3}(y_1\tau_1)e_{k_4\sigma_4}(y_2\tau_2)}\;[\,v\,(e_{k_1\sigma_1}\otimes e_{k_2\sigma_2})](y_1\tau_1, y_2\tau_2) \\
&= \sum_{y_1\tau_1, y_2\tau_2} \bar e_{k_3\sigma_3}(y_1\tau_1)\bar e_{k_4\sigma_4}(y_2\tau_2)\; V(y_1-y_2)\, e_{k_1\sigma_1}(y_1\tau_1)e_{k_2\sigma_2}(y_2\tau_2) \\
&= \delta_{\sigma_1,\sigma_3}\,\delta_{\sigma_2,\sigma_4} \sum_{y_1,y_2} \bar e_{k_3}(y_1)\bar e_{k_4}(y_2)\; V(y_1-y_2)\, e_{k_1}(y_1)e_{k_2}(y_2) \\
&= \delta_{\sigma_1,\sigma_3}\,\delta_{\sigma_2,\sigma_4}\,\langle k_3,k_4|v|k_1,k_2\rangle \qquad (36)
\end{aligned}$$

wobei das Spin-unabhängige Matrix-Element $\langle k_3,k_4|v|k_1,k_2\rangle$ genau dasselbe ist, was wir oben schon berechnet haben. Also bekommen wir

$$H_n^a \;=\; \sum_{k\sigma,p\tau} c^+_{p\tau}\,\langle p\tau|h|k\sigma\rangle\, c_{k\sigma} \;+\; \tfrac{1}{2}\sum_{k_1k_2k_3k_4}\sum_{\sigma_1\sigma_2} c^+_{k_3\sigma_1}c^+_{k_4\sigma_2}\,\langle k_3,k_4|v|k_1,k_2\rangle\, c_{k_2\sigma_2}c_{k_1\sigma_1} \qquad (37)$$

Wegen

$$\langle p\tau|h|k\sigma\rangle \;=\; \langle\tau|\sigma\rangle\,\langle p|h|k\rangle \;=\; \delta_{\sigma,\tau}\,\delta_{k,p}\,\varepsilon_k \qquad (38)$$

erhalten wir dann

$$\begin{aligned}
H_n^a \;=\; &\sum_{k\sigma}\varepsilon_k\, c^+_{k\sigma}c_{k\sigma} \;+ \qquad (39)\\
&\tfrac{1}{2}\sum_{\sigma_1\sigma_2}\sum_{k_1k_2k_3k_4}\tfrac{(\Delta k)^d}{(2\pi)^d}\,\delta_{k_1+k_2\,,\,k_3+k_4}\;c^+_{k_3\sigma_1}c^+_{k_4\sigma_2}\,\hat V(k_3-k_1)\,c_{k_2\sigma_2}c_{k_1\sigma_1}
\end{aligned}$$

und mit

$$V(x_1-x_2) \;:=\; u\,\delta_{x_1,x_2}/(\Delta x)^d \qquad (40)$$

wird das dann zu

$$H_n^a \;=\; \sum_{k\sigma}\varepsilon_k\, c^+_{k\sigma}\,c_{k\sigma} \;+\; \tfrac{u}{2}\sum_{\sigma_1\sigma_2}\sum_{k_1k_2k_3k_4}\tfrac{(\Delta k)^d}{(2\pi)^d}\,\delta_{k_1+k_2\,,\,k_3+k_4}\;c^+_{k_3\sigma_1}c^+_{k_4\sigma_2}\,c_{k_2\sigma_2}c_{k_1\sigma_1} \qquad (41)$$

Und wegen

$$\begin{aligned}
&\sum_{k_1k_2k_3k_4}\delta_{k_1+k_2\,,\,k_3+k_4}\;c^+_{k_3\sigma_1}c^+_{k_4\sigma_2}\,c_{k_2\sigma_2}c_{k_1\sigma_1} \;= \\
&\qquad \sum_{k_1k_2k_3k_4}\tfrac{\delta_{k_1+k_2\,,\,k_3+k_4}}{2}\,(c^+_{k_3\sigma_1}c^+_{k_4\sigma_2}+c^+_{k_4\sigma_1}c^+_{k_3\sigma_2})\,c_{k_2\sigma_2}c_{k_1\sigma_1} \\
&= \sum_{k_1k_2k_3k_4}\tfrac{\delta_{k_1+k_2\,,\,k_3+k_4}}{4}\,(c^+_{k_3\sigma_1}c^+_{k_4\sigma_2}+c^+_{k_4\sigma_1}c^+_{k_3\sigma_2})\,(c_{k_2\sigma_2}c_{k_1\sigma_1}+c_{k_1\sigma_2}c_{k_2\sigma_1}) \\
&= \sum_{k_1k_2k_3k_4}\tfrac{\delta_{k_1+k_2\,,\,k_3+k_4}}{4}\,(c^+_{k_3\sigma_1}c^+_{k_4\sigma_2}-c^+_{k_3\sigma_2}c^+_{k_4\sigma_1})\,(c_{k_2\sigma_2}c_{k_1\sigma_1}-c_{k_2\sigma_1}c_{k_1\sigma_2})
\end{aligned}$$

tun in der Spin-Summe wieder die Terme mit $\sigma_1 = \sigma_2$ verschwinden und wir erhalten

$$\begin{aligned} H_n^a &= \sum_{k\sigma} \varepsilon_k \; c^+_{k\sigma} c_{k\sigma} \\ &\quad + \tfrac{u}{2} \sum_{k_1 k_2 k_3 k_4} \tfrac{(\Delta k)^d}{(2\pi)^d} \; \delta_{k_1+k_2\,,\,k_3+k_4} \;\; c^+_{k_3\uparrow} c^+_{k_4\downarrow} \, c_{k_2\downarrow} c_{k_1\uparrow} \\ &\quad + \tfrac{u}{2} \sum_{k_1 k_2 k_3 k_4} \tfrac{(\Delta k)^d}{(2\pi)^d} \; \delta_{k_1+k_2\,,\,k_3+k_4} \;\; c^+_{k_3\downarrow} c^+_{k_4\uparrow} \, c_{k_2\uparrow} c_{k_1\downarrow} \\ &= \sum_{k\sigma} \varepsilon_k \; c^+_{k\sigma} c_{k\sigma} \; + \; u \sum_{k_1 k_2 k_3 k_4} \tfrac{(\Delta k)^d}{(2\pi)^d} \, \delta_{k_1+k_2\,,\,k_3+k_4} \;\; c^+_{k_3\uparrow} c^+_{k_4\downarrow} \, c_{k_2\downarrow} c_{k_1\uparrow} \end{aligned} \tag{42}$$