Hochschule RheinMain
Prof. Dr. D. Lehmann SS 2023

10. Übungsblatt zur Vorlesung
Mathematische Methoden in der Quantenmechanik

Aufgabe 1: Gegeben sei der Hamilton-Operator

$$H_n^s \;=\; -\tfrac{\hbar^2}{2m}\sum_{i=1}^{n}\Delta^\Gamma_{x_i} \;+\; \tfrac{1}{2}\sum_{\substack{i,j=1\\ i\neq j}}^{n} V(x_i-x_j) \;:\; L^2_s(\Gamma^n)\;\to\; L^2_s(\Gamma^n) \tag{1}$$

mit

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

der mit positivem Gitterabstand Δx diskretisierte Ortsraumwürfel mit Kantenlänge $2L$ und Δ^Γ der diskrete Laplace-Operator auf Γ_x. Wählen Sie als Ein-Teilchen Basis von $L^2(\Gamma)$ die Eigenfunktionen des diskreten Laplace-Operators, die hatten wir im Theorem 2.2 im week3 berechnet:

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

mit den Energie-Eigenwerten ε_k gegeben durch

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

Weiter seien a_k^+, a_k die zu der ONB (2) gehörenden bosonischen Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren gegeben durch Definition 8.1 aus dem week8. Zeigen Sie mit Hilfe des allgemeinen Theorems 9.1: Der Hamilton-Operator (1) besitzt die Impulsraum-Darstellung

$$H_n^s \;=\; \sum_k \varepsilon_k\, a_k^+ a_k \;+\; \tfrac{1}{2}\sum_{k_1k_2k_3k_4} \tfrac{(\Delta k)^d}{(2\pi)^d}\, \delta_{k_1+k_2\,,\,k_3+k_4}\; a^+_{k_3}a^+_{k_4}\, \hat V(k_1-k_3)\, a_{k_2}a_{k_1}$$

mit

$$\hat V(k) \;:=\; \sum_{x\in\Gamma_x} (\Delta x)^d\; V(x)\, e^{-ikx}$$

Insbesondere für die Wahl

$$V(x_1-x_2) \;:=\; 2u\,\delta_{x_1,x_2}/(\Delta x)^d$$

bekommen wir die Darstellung

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

Aufgabe 2: Beweisen Sie die fermionische Version von Aufgabe 1: Gegeben sei der Hamilton-Operator

$$H_n^a \;=\; -\tfrac{\hbar^2}{2m}\sum_{i=1}^{n}\Delta_{x_i}^{\Gamma} \;+\; \tfrac{1}{2}\sum_{\substack{i,j=1\\ i\neq j}}^{n} V(x_i-x_j) \;:\; L_a^2(\Gamma^n) \;\to\; L_a^2(\Gamma^n) \tag{3}$$

mit

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

Wählen Sie die folgende Ein-Teilchen Basis von $L^2(\Gamma)$,

$$B \;=\; \Big\{\, e_{k\sigma} = e_{k\sigma}(x\tau) := e_k(x)\,\delta_{\sigma,\tau} \,:\, \Gamma_x\times\{\uparrow,\downarrow\}\to\mathbb{C} \;\Big|\; (k,\sigma)\in\Gamma_k\times\{\uparrow,\downarrow\}\,\Big\} \tag{4}$$

mit den e_k aus Aufgabe 1 und Kroenecker-Deltas $\delta_{\sigma,\tau}$ für die Spin-Variablen. Die $c_{k\sigma}^+, c_{k\sigma}$ seien die zu der ONB (4) gehörenden fermionischen Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren gegeben durch Definition 8.1. Zeigen Sie mit Hilfe des allgemeinen Theorems 9.1 aus dem week9: Der Hamilton-Operator (3) besitzt die Impulsraum-Darstellung

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

Insbesondere mit der Wahl

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

erhalten wir die Darstellung

$$H_n^a \;=\; \sum_{k\sigma}\varepsilon_k\, c_{k\sigma}^+c_{k\sigma} \;+\; u\sum_{k_1k_2k_3k_4}\tfrac{(\Delta k)^d}{(2\pi)^d}\,\delta_{k_1+k_2\,,\,k_3+k_4}\; c_{k_3\uparrow}^+c_{k_4\downarrow}^+\,c_{k_2\downarrow}c_{k_1\uparrow}$$