week10: Der Hamilton-Operator in zweiter Quantisierung: Ortsraum-Darstellung für Bosonen und Fermionen

Letztes Mal hatten wir in dem week9 das folgende Theorem bewiesen:

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

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

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

Die bosonischen und fermionischen Vielteilchen-Operatoren H_n^s und H_n^a seien 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 Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren aus der Definition 8.1 aus dem week8.

Ortsraum-Darstellung, Bosonen, ohne Spin

Der Hamilton-Operator sei gegeben durch

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

mit

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

der mit positivem Gitterabstand Δx diskretisierte Würfel mit Kantenlänge $2L$ und Δ^Γ der diskrete Laplace-Operator auf Γ_x. Wir wählen die folgende Ein-Teilchen Basis von $L^2(\Gamma)$:

$$B \;=\; \Big\{\, e_x := \delta_x \;:\; \Gamma_x \;\to\; \mathbb{C} \;\Big|\; y \to \delta_x(y) := \delta_{x,y}\;,\;\; x \,\in\, \Gamma_x \,\Big\} \tag{14}$$

Das ist nicht anderes als die Standardbasis von $\mathbb{C}^{|\Gamma_x|}$, allerdings so hingeschrieben, dass wir keine explizite Reihenfolge der Koordinaten von $\mathbb{C}^{|\Gamma_x|} = L^2(\Gamma_x)$ festlegen müssen. Das $\delta_{x,y}$ ist ein einfaches Kroenecker-Delta,

$$\delta_{x,y} \;:=\; \begin{cases} 1 & \text{für } x = y \\ 0 & \text{für } x \neq y \end{cases} \tag{15}$$

und das Skalarprodukt in $L^2(\Gamma_x)$ ist das Standardskalarprodukt in $\mathbb{C}^{|\Gamma_x|}$, da sind also keine Vorfaktoren von $(\Delta x)^d$ mit enthalten. Berechnen wir das Matrix-Element

$$\langle \gamma,\delta|v|\alpha,\beta\rangle \;:=\; (\, e_\gamma \otimes e_\delta\,,\; v\; e_\alpha \otimes e_\beta\,) \tag{16}$$

mit

$$(vf_2)(x,y) \;=\; V(x-y)\, f_2(x,y) \tag{17}$$

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

$$(\alpha,\beta,\gamma,\delta) \;=\; (x_1,x_2,x_3,x_4) \tag{18}$$

und wir bekommen dann

$$\begin{aligned}
\langle x_3,x_4|v|x_1,x_2\rangle \;&:=\; (\,\delta_{x_3}\otimes\delta_{x_4}\,,\; v\;\delta_{x_1}\otimes\delta_{x_2}\,) \\
&=\; \sum_{y_1,y_2} \overline{\delta_{x_3}(y_1)\delta_{x_4}(y_2)}\;[\,v\,(\delta_{x_1}\otimes\delta_{x_2})](y_1,y_2) \\
&=\; \sum_{y_1,y_2} \delta_{x_3}(y_1)\delta_{x_4}(y_2)\; V(y_1-y_2)\,\delta_{x_1}(y_1)\delta_{x_2}(y_2) \\
&=\; \delta_{x_1,x_3}\,\delta_{x_2,x_4}\; V(x_1-x_2)
\end{aligned} \tag{19}$$

Das liefert die Darstellung

$$
\begin{aligned}
H_n^s \;&=\; \sum_{x,y} a_y^+ \;\langle y|h|x\rangle\; a_x \;+\; \tfrac{1}{2} \sum_{x_1x_2x_3x_4} a_{x_3}^+ a_{x_4}^+ \;\langle x_3, x_4|v|x_1, x_2\rangle\; a_{x_2} a_{x_1} \\
&=\; -\tfrac{\hbar^2}{2m} \sum_{x,y} a_y^+ \;\Delta_{y,x}^{\Gamma}\; a_x \;+\; \tfrac{1}{2} \sum_{x_1,x_2} a_{x_1}^+ a_{x_2}^+ \; V(x_1 - x_2)\; a_{x_2} a_{x_1} \qquad (20)
\end{aligned}
$$

mit den Matrix-Elementen für den diskreten Laplace-Operator

$$
\Delta_{x,y}^{\Gamma} \;=\; \tfrac{1}{(\Delta x)^2} \begin{cases} +1 & \text{falls } |x-y| = \Delta x \\ -2d & \text{falls } x = y \\ \;\;0 & \text{sonst} \end{cases} \qquad (21)
$$

Oder mit

$$
\varepsilon_{x,y} \;:=\; -\tfrac{\hbar^2}{2m}\,\Delta_{x,y}^{\Gamma} \;=\; \tfrac{\hbar^2}{2m(\Delta x)^2} \begin{cases} -1 & \text{falls } |x-y| = \Delta x \\ +2d & \text{falls } x = y \\ \;\;0 & \text{sonst} \end{cases} \qquad (22)
$$

liest sich das dann folgendermassen:

$$
H_n^s \;=\; \sum_{x,y} a_y^+ \;\varepsilon_{y,x}\; a_x \;+\; \tfrac{1}{2} \sum_{x_1,x_2} a_{x_1}^+ a_{x_2}^+ \; V(x_1 - x_2)\; a_{x_2} a_{x_1} \qquad (23)
$$

Wählt man dann noch

$$
V(x_1 - x_2) \;:=\; 2u\,\delta_{x_1,x_2} \qquad (24)
$$

bekommt man den Hamilton-Operator für das d-dimensionale Bose-Hubbard Modell,

$$
H_n^s \;=\; \sum_{x,y} a_y^+ \;\varepsilon_{y,x}\; a_x \;+\; u \sum_{x} a_x^+ a_x^+ \; a_x a_x \qquad (25)
$$

Das $V(x_1 - x_2)$ aus (24) ist im wesentlichen null im Kontinuumslimes $\Delta x \to 0$, möchte man eine δ-Funktion oder genauer eine δ-Distribution $2u\,\delta(x_1 - x_2)$ bekommen, dann müsste man $V(x_1 - x_2) \;=\; 2u\,\delta_{x_1,x_2}/(\Delta x)^d$ setzen.

Ortsraum-Darstellung, Fermionen, Spin 1/2

Der Hamilton-Operator sei wieder gegeben durch

$$
H_n \;=\; -\tfrac{\hbar^2}{2m} \sum_{i=1}^{n} \Delta_{x_i}^{\Gamma_x} \;+\; \tfrac{1}{2} \sum_{\substack{i,j=1 \\ i \neq j}}^{n} V(x_i - x_j) \qquad (26)
$$

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

$$
\Gamma_x \;=\; [-L, +L]_{\Delta x}^{d} \qquad (27)
$$

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

$$\Gamma \;:=\; \Gamma_x \times \{\uparrow,\downarrow\} \;=\; [-L,+L]^d_{\Delta x} \times \{\uparrow,\downarrow\} \tag{28}$$

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

$$B \;=\; \Big\{\, e_{x\sigma} := \delta_{x\sigma} : \Gamma_x \times \{\uparrow,\downarrow\} \to \mathbb{C} \;\Big|\; (y,\tau) \to \delta_{x\sigma}(y,\tau) := \delta_{x,y}\,\delta_{\sigma,\tau}\,,\;\; (x,\sigma) \in \Gamma \,\Big\} \tag{29}$$

Berechnen wir wieder das Matrix-Element

$$\langle \gamma,\delta|v|\alpha,\beta\rangle \;:=\; (\, e_\gamma \otimes e_\delta \,,\, v\, e_\alpha \otimes e_\beta \,) \tag{30}$$

mit

$$(vf_2)(x\sigma,y\tau) \;=\; V(x-y)\, f_2(x\sigma,y\tau) \tag{31}$$

die Wechselwirkung ist also Spin-unabhängig. Man hat nur eine implizite Spin-Abhängigkeit dadurch gegeben, dass im antisymmetrischen Fall keine zwei Teilchen denselben Zustand besetzen dürfen. Wenn wir gleich wieder den Fall $V(x-y) = \delta_{x,y}$ betrachten und es befindet sich ein Elektron am Gitterplatz x, dann kann sich maximal nur ein weiteres Elektron an demselben Gitterplatz befinden und es muss den entgegengesetzen Spin haben. Berechnen wir das Matrixelement. Die Indizes $\alpha, \beta, \gamma, \delta$ für die Basisvektoren sind jetzt also (Ortsraum,Spin)-Paare, sagen wir

$$(\alpha,\beta,\gamma,\delta) \;=\; (x_1\sigma_1, x_2\sigma_2, x_3\sigma_3, x_4\sigma_4) \tag{32}$$

und wir bekommen dann

$$\begin{aligned}
\langle x_3\sigma_3, x_4\sigma_4|v|x_1\sigma_1, x_2\sigma_2\rangle \;&:=\; (\, \delta_{x_3\sigma_3} \otimes \delta_{x_4\sigma_4} \,,\, v\, \delta_{x_1\sigma_1} \otimes \delta_{x_2\sigma_2} \,) \\
&= \sum_{y_1\tau_1, y_2\tau_2} \overline{\delta_{x_3\sigma_3}(y_1\tau_1)\delta_{x_4\sigma_4}(y_2\tau_2)}\, [v\,(\delta_{x_1\sigma_1} \otimes \delta_{x_2\sigma_2})](y_1\tau_1, y_2\tau_2) \\
&= \sum_{y_1\tau_1, y_2\tau_2} \delta_{x_3\sigma_3}(y_1\tau_1)\delta_{x_4\sigma_4}(y_2\tau_2)\, V(y_1-y_2)\, \delta_{x_1\sigma_1}(y_1\tau_1)\delta_{x_2\sigma_2}(y_2\tau_2) \\
&= \delta_{x_1,x_3}\, \delta_{x_2,x_4}\, \delta_{\sigma_1,\sigma_3}\, \delta_{\sigma_2,\sigma_4}\, V(x_1-x_2)
\end{aligned} \tag{33}$$

Das liefert folgende Darstellung: Zunächst

$$\begin{aligned}
H_n^a \;&=\; \sum_{x\sigma, y\tau} c^+_{y\tau}\, \langle y\tau|h|x\sigma\rangle\, c_{x\sigma} \\
&\quad + \tfrac{1}{2} \sum_{x_1x_2x_3x_4} \sum_{\sigma_1\sigma_2\sigma_3\sigma_4} c^+_{x_3\sigma_3} c^+_{x_4\sigma_4}\, \langle x_3\sigma_3, x_4\sigma_4|v|x_1\sigma_1, x_2\sigma_2\rangle\, c_{x_2\sigma_2} c_{x_1\sigma_1}
\end{aligned} \tag{34}$$

Wegen

$$\langle y\tau|h|x\sigma\rangle \;=\; \langle\tau|\sigma\rangle\, \langle y|h|x\rangle \;=\; \delta_{\sigma,\tau}\, \langle y|h|x\rangle \tag{35}$$

und mit (33) erhalten wir dann

$$
\begin{aligned}
H_n^a \;&=\; \sum_{x\sigma,y\tau} \delta_{\sigma,\tau}\; c_{y\tau}^+ \;\langle y|h|x\rangle\; c_{x\sigma} \;+\; \tfrac{1}{2} \sum_{x_1x_2} \sum_{\sigma_1\sigma_2} c_{x_1\sigma_1}^+ c_{x_2\sigma_2}^+ \; V(x_1-x_2)\; c_{x_2\sigma_2} c_{x_1\sigma_1} \\
&=\; \sum_{\sigma} \sum_{x,y} c_{y\sigma}^+ \;\langle y|h|x\rangle\; c_{x\sigma} \;+\; \tfrac{1}{2} \sum_{x_1x_2} \sum_{\sigma_1\sigma_2} c_{x_1\sigma_1}^+ c_{x_2\sigma_2}^+ \; V(x_1-x_2)\; c_{x_2\sigma_2} c_{x_1\sigma_1}
\end{aligned}
\tag{36}
$$

Wir setzen wieder

$$
\varepsilon_{x,y} \;:=\; \langle y|h|x\rangle \;=\; -\tfrac{\hbar^2}{2m}\,\Delta^\Gamma_{x,y} \;=\; \tfrac{\hbar^2}{2m(\Delta x)^2} \begin{cases} -1 & \text{falls } |x-y| = \Delta x \\ +2d & \text{falls } x = y \\ \;\;0 & \text{sonst} \end{cases}
\tag{37}
$$

so dass

$$
H_n^a \;=\; \sum_{x,y} \varepsilon_{x,y} \left(c_{y\uparrow}^+ c_{x\uparrow} + c_{y\downarrow}^+ c_{x\downarrow} \right) \;+\; \tfrac{1}{2} \sum_{x_1x_2} \sum_{\sigma_1\sigma_2} c_{x_1\sigma_1}^+ c_{x_2\sigma_2}^+ \; V(x_1-x_2)\; c_{x_2\sigma_2} c_{x_1\sigma_1}
\tag{38}
$$

Wählt man dann noch (hier lassen wir die 2 weg, u, nicht $2u$)

$$
V(x_1-x_2) \;:=\; u\,\delta_{x_1,x_2}
\tag{39}
$$

bekommt man den Hamilton-Operator für das d-dimensionale Fermi-Hubbard Modell: Zunächst

$$
H_n^a \;=\; \sum_{x,y} \varepsilon_{x,y} \left(c_{y\uparrow}^+ c_{x\uparrow} + c_{y\downarrow}^+ c_{x\downarrow} \right) \;+\; \tfrac{u}{2} \sum_{x_1} \sum_{\sigma_1\sigma_2} c_{x_1\sigma_1}^+ c_{x_1\sigma_2}^+ \; c_{x_1\sigma_2} c_{x_1\sigma_1}
\tag{40}
$$

und wegen

$$
c_{x\sigma}^2 \;=\; (c_{x\sigma}^+)^2 \;=\; 0
\tag{41}
$$

reduziert sich das dann auf (mit $\sigma^c := \downarrow$ falls $\sigma = \uparrow$ und umgekehrt)

$$
\begin{aligned}
H_n^a \;&=\; \sum_{x,y} \varepsilon_{x,y} \left(c_{y\uparrow}^+ c_{x\uparrow} + c_{y\downarrow}^+ c_{x\downarrow} \right) \;+\; \tfrac{u}{2} \sum_{x} \sum_{\sigma} c_{x\sigma}^+ c_{x\sigma^c}^+ \; c_{x\sigma^c} c_{x\sigma} \\
&=\; \sum_{x,y} \varepsilon_{x,y} \left(c_{y\uparrow}^+ c_{x\uparrow} + c_{y\downarrow}^+ c_{x\downarrow} \right) \;+\; \tfrac{u}{2} \sum_{x} \left(c_{x\uparrow}^+ c_{x\downarrow}^+ \; c_{x\downarrow} c_{x\uparrow} + c_{x\downarrow}^+ c_{x\uparrow}^+ \; c_{x\uparrow} c_{x\downarrow} \right) \\
&=\; \sum_{x,y} \varepsilon_{x,y} \left(c_{y\uparrow}^+ c_{x\uparrow} + c_{y\downarrow}^+ c_{x\downarrow} \right) \;+\; u \sum_{x} c_{x\uparrow}^+ c_{x\downarrow}^+ \; c_{x\downarrow} c_{x\uparrow}
\end{aligned}
\tag{42}
$$

und das ist dann der Hamilton-Operator für das Fermi-Hubbard Modell. Dieses Modell ist dann für verschiedene Gittertypen und für verschiedene Definitionen der 'hopping matrix' $\varepsilon = (\varepsilon_{x,y})$ von Interesse, insbesondere wird es im Zusammenhang mit Hochtemperatur-Supraleitung diskutiert.

Wir bemerken wieder, dass das $V(x_1-x_2)$ aus (39) im wesentlichen null ist im Kontinuumslimes $\Delta x \to 0$, möchte man eine δ-Funktion oder genauer eine δ-Distribution $u\,\delta(x_1-x_2)$ bekommen, dann müsste man $V(x_1-x_2) = u\,\delta_{x_1,x_2}/(\Delta x)^d$ setzen.