week9: Der Hamilton-Operator in zweiter Quantisierung

Die Resultate dieses week9 sind zusammengefasst in dem Theorem 9.1 auf Seite 6. Es sei wieder Γ eine endliche Menge, etwa

$$\Gamma \;=\; \Gamma_x \;=\; [-L,+L]^d_{\Delta x} \tag{1}$$

der mit positivem Gitterabstand Δx diskretisierte Ortsraum-Würfel mit Kantenlänge $2L$, und

$$\mathcal{B} \;=\; \left\{\, e_\alpha : \Gamma \to \mathbb{C} \;\mid\; 1 \le \alpha \le |\Gamma| \;\right\} \tag{2}$$

sei eine ONB von $L^2(\Gamma)$, orthonormal bezüglich des Standardskalarproduktes in $\mathbb{C}^{|\Gamma|}$. Wir betrachten einen beliebigen Operator oder auch Einteilchen-Operator (gleich haben wir noch einen Zweiteilchen-Operator)

$$h \;:\; L^2(\Gamma) \;\to\; L^2(\Gamma) \tag{3}$$

Die Wirkung auf ein beliebiges $f \in L^2(\Gamma)$ können wir schreiben als

$$hf \;=\; h\sum_\alpha e_\alpha\,(e_\alpha, f) \;=\; \sum_{\alpha,\beta} e_\beta\,(e_\beta, he_\alpha)\,(e_\alpha, f) \tag{4}$$

oder auch

$$(hf)(x) \;=\; \sum_{\alpha,\beta} e_\beta(x)\, h_{\beta\alpha}\,(e_\alpha, f) \tag{5}$$

mit den Matrix-Elementen

$$h_{\beta\alpha} \;:=\; (e_\beta, he_\alpha) \tag{6}$$

Wir betrachten weiter den dazugehörigen n-Teilchen Operator definiert durch

$$H_n \;=\; \sum_{i=1}^n h_i \;:\; L^2(\Gamma^n) \;\to\; L^2(\Gamma^n) \tag{7}$$

$$(h_i f_n)(x_1,\cdots,x_n) \;:=\; \sum_{\alpha,\beta} e_\beta(x_i)\, h_{\beta\alpha}\,(e_\alpha, f_n)_i(x_1,\cdots\widehat{x_i}\cdots,x_n) \tag{8}$$

mit dem Skalarprodukt für die i-te Koordinate $(e_\alpha, f_n)_i \in L^2(\Gamma^{n-1})$ gegeben durch

$$(e_\alpha, f_n)_i(x_1,\cdots\widehat{x_i}\cdots,x_n) \;:=\; \sum_{y_i\in\Gamma} \bar{e}_\alpha(y_i)\; f_n(x_1,\cdots,y_i,\cdots,x_n) \tag{9}$$

Wir haben dann etwa

$$
\begin{aligned}
(H_n f_n)(x_1,\cdots,x_n) &= \sum_{i=1}^{n}(h_i f_n)(x_1,\cdots,x_n) \\
&= \sum_{i=1}^{n}\sum_{\alpha,\beta} e_\beta(x_i)\, h_{\beta\alpha}\,(e_\alpha,f_n)_i(x_1,\cdots\widehat{x_i}\cdots,x_n) \\
&= \sum_{i=1}^{n}\sum_{\alpha,\beta}\sum_{y_i\in\Gamma} e_\beta(x_i)\, h_{\beta\alpha}\,\bar{e}_\alpha(y_i)\; f_n(x_1,\cdots,y_i,\cdots,x_n) \\
&= \sum_{\alpha,\beta} h_{\beta\alpha}\sum_{i=1}^{n}\sum_{y_i\in\Gamma} e_\beta(x_i)\,\bar{e}_\alpha(y_i)\; f_n(x_1,\cdots,y_i,\cdots,x_n) \qquad (10)
\end{aligned}
$$

Für identische Teilchen müssen wir das H_n auf den Raum der symmetrischen oder antisymmetrischen Wellenfunktionen einschränken, also definieren wir

$$
\begin{aligned}
H_n^s &:= H_n\big|_{L_s^2(\Gamma^n)} \qquad (11)\\
H_n^a &:= H_n\big|_{L_a^2(\Gamma^n)} \qquad (12)
\end{aligned}
$$

Erinnern wir uns an die Formeln aus Folgerung 8.1, es gilt sowohl für den symmetrischen als auch für den antisymmetrischen Fall

$$
\begin{aligned}
(a_\beta^+ a_\alpha f_n)(x_1,\cdots,x_n) &= \sum_{i=1}^{n}\sum_{y_i\in\Gamma} e_\beta(x_i)\,\bar{e}_\alpha(y_i)\, f_n(x_1,\cdots,x_{i-1},y_i,x_{i+1},\cdots,x_n) \qquad (13)\\
(c_\beta^+ c_\alpha g_n)(x_1,\cdots,x_n) &= \sum_{i=1}^{n}\sum_{y_i\in\Gamma} e_\beta(x_i)\,\bar{e}_\alpha(y_i)\, g_n(x_1,\cdots,x_{i-1},y_i,x_{i+1},\cdots,x_n) \qquad (14)
\end{aligned}
$$

mit $f_n \in L_s^2(\Gamma^n)$ und $g_n \in L_a^2(\Gamma^n)$. Damit bekommen wir dann also die Darstellungen

$$
\begin{aligned}
H_n^s &= \sum_{\alpha,\beta} h_{\beta\alpha}\, a_\beta^+ a_\alpha \;:\; L_s^2(\Gamma^n) \to L_s^2(\Gamma^n) \qquad (15)\\
H_n^a &= \sum_{\alpha,\beta} h_{\beta\alpha}\, c_\beta^+ c_\alpha \;:\; L_a^2(\Gamma^n) \to L_a^2(\Gamma^n) \qquad (16)
\end{aligned}
$$

Zweiteilchen-Operator

Betrachten wir jetzt einen beliebigen Zweiteilchen-Operator

$$
v \;:\; L^2(\Gamma^2) \to L^2(\Gamma^2) \qquad (17)
$$

etwa

$$
(vf)(x,y) := v(x,y)\, f(x,y) \qquad (18)
$$

mit einer Funktion $v(x,y)$. Typischerweise ist $v(x,y) = v(y,x)$, dann bildet v symmetrische auf symmetrische und antisymmetrische auf antisymmetrische Wellenfunktionen ab. Wir können schreiben, zunächst mal ohne irgendwelche Symmetrien zu betrachten,

$$
f(x,y) = \sum_{\alpha,\beta}(e_\alpha\otimes e_\beta)(x,y)\;(e_\alpha\otimes e_\beta, f) \qquad (19)
$$

und

$$
\begin{aligned}
(vf)(x,y) &= \sum_{\alpha,\beta} [v(e_\alpha \otimes e_\beta)](x,y)\ (e_\alpha \otimes e_\beta, f) && (20) \\
&= \sum_{\alpha\beta\gamma\delta} (e_\gamma \otimes e_\delta)(x,y)\ (e_\gamma \otimes e_\delta, v[e_\alpha \otimes e_\beta])\ (e_\alpha \otimes e_\beta, f) && (21)
\end{aligned}
$$

Der zugehörige n-Teilchen-Operator ist dann definiert durch

$$
\begin{aligned}
(H_n f_n)(x_1, \cdots, x_n) &:= \frac{1}{2} \sum_{\substack{i,j=1 \\ i \neq j}}^{n} \sum_{\alpha\beta\gamma\delta} (e_\gamma \otimes e_\delta)(x_i, x_j) \left(e_\gamma \otimes e_\delta\, ,\, v[e_\alpha \otimes e_\beta] \right) \times \\
&\qquad\qquad (e_\alpha \otimes e_\beta, f_n)_{i,j}(x_1, \cdots \widehat{x_i} \cdots \widehat{x_j} \cdots x_n) \qquad (22)
\end{aligned}
$$

mit dem Skalarprodukt für die i-te und j-te Koordinate

$$
(e_\alpha \otimes e_\beta, f_n)_{i,j}(x_1, \cdots \widehat{x_i} \cdots \widehat{x_j} \cdots x_n) := \sum_{y_i, y_j} \bar{e}_\alpha(y_i)\, \bar{e}_\beta(y_j)\ f_n(x_1, \cdots y_i \cdots y_j \cdots x_n) \qquad (23)
$$

Wir können dann etwa schreiben

$$
\begin{aligned}
(H_n f_n)(x_1, \cdots, x_n) &= \frac{1}{2} \sum_{\substack{i,j=1 \\ i \neq j}}^{n} \sum_{\alpha\beta\gamma\delta} e_\gamma(x_i)\, e_\delta(x_j)\ \langle \gamma, \delta | v | \alpha, \beta \rangle \times \\
&\qquad \sum_{y_i, y_j} \bar{e}_\alpha(y_i)\, \bar{e}_\beta(y_j)\ f_n(x_1, \cdots y_i \cdots y_j \cdots x_n) \qquad (24)
\end{aligned}
$$

mit den Matrix-Elementen

$$
\langle \gamma, \delta | v | \alpha, \beta \rangle := \left(e_\gamma \otimes e_\delta\, ,\, v[e_\alpha \otimes e_\beta] \right) \qquad (25)
$$

Wir ziehen die Summe über die Basis-Zustände wieder nach vorne und schreiben

$$
\begin{aligned}
(H_n f_n)(x_1, \cdots, x_n) &= \qquad (26) \\
\frac{1}{2} \sum_{\alpha\beta\gamma\delta} \langle \gamma, \delta | v | \alpha, \beta \rangle & \sum_{\substack{i,j=1 \\ i \neq j}}^{n} \sum_{y_i, y_j} e_\gamma(x_i)\, e_\delta(x_j)\, \bar{e}_\alpha(y_i)\, \bar{e}_\beta(y_j)\ f_n(x_1, \cdots y_i \cdots y_j \cdots x_n)
\end{aligned}
$$

Wir müssen das wieder auf den Raum der symmetrischen oder antisymmetrischen Wellenfunktionen einschränken, also definieren wir wieder

$$
\begin{aligned}
H_n^s &:= H_n \big|_{L^2_s(\Gamma^n)} && (27) \\
H_n^a &:= H_n \big|_{L^2_a(\Gamma^n)} && (28)
\end{aligned}
$$

und erinnern uns wieder an die Formeln aus Folgerung 8.1,

$$
\begin{aligned}
(a^+_\gamma a_\alpha f_n)(x_1, \cdots, x_n) &= \sum_{i=1}^{n} \sum_{y_i \in \Gamma} e_\gamma(x_i)\, \bar{e}_\alpha(y_i)\, f_n(x_1, \cdots, y_i, \cdots, x_n) \\
(c^+_\delta c_\beta g_n)(x_1, \cdots, x_n) &= \sum_{i=1}^{n} \sum_{y_i \in \Gamma} e_\delta(x_i)\, \bar{e}_\beta(y_i)\, g_n(x_1, \cdots, y_i, \cdots, x_n)
\end{aligned}
$$

für symmetrisches f_n und antisymmetrisches g_n. Betrachten wir zunächst den symmetrischen Fall. Wir können schreiben

$$\begin{aligned}
(a_\delta^+ a_\beta [a_\gamma^+ a_\alpha f_n])(x_1, \cdots, x_n) &= \sum_{i=1}^n \sum_{y_i \in \Gamma} e_\delta(x_i)\, \bar{e}_\beta(y_i)\, [a_\gamma^+ a_\alpha f_n](x_1, \cdots, y_i, \cdots, x_n) \\
= \sum_{i=1}^n \sum_{y_i \in \Gamma} e_\delta(x_i)\, \bar{e}_\beta(y_i) & \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^n \sum_{y_j \in \Gamma} e_\gamma(x_j)\, \bar{e}_\alpha(y_j)\, f_n(x_1, \cdots, y_i, \cdots, y_j, \cdots, x_n) \\
+ \sum_{i=1}^n \sum_{y_i \in \Gamma} e_\delta(x_i)\, \bar{e}_\beta(y_i) & \sum_{z_i \in \Gamma} e_\gamma(y_i)\, \bar{e}_\alpha(z_i)\, f_n(x_1, \cdots, z_i, \cdots, x_n) \qquad (29)
\end{aligned}$$

oder

$$\begin{aligned}
(a_\delta^+ a_\beta [a_\gamma^+ a_\alpha f_n])(x_1, \cdots, x_n) &= \delta_{\beta,\gamma} \sum_{i=1}^n \sum_{z_i \in \Gamma} e_\delta(x_i)\, \bar{e}_\alpha(z_i)\, f_n(x_1, \cdots, z_i, \cdots, x_n) \\
+ \sum_{i=1}^n \sum_{y_i \in \Gamma} e_\delta(x_i)\, \bar{e}_\beta(y_i) & \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^n \sum_{y_j \in \Gamma} e_\gamma(x_j)\, \bar{e}_\alpha(y_j)\, f_n(x_1, \cdots, y_i, \cdots, y_j, \cdots, x_n) \\
= \delta_{\beta,\gamma}\, (a_\delta^+ a_\alpha f_n)(x_1, \cdots, x_n) & \\
+ \sum_{\substack{i,j=1 \\ i \neq j}}^n \sum_{y_i, y_j \in \Gamma} e_\delta(x_i)\, e_\gamma(x_j)\, \bar{e}_\beta(y_i)\, & \bar{e}_\alpha(y_j)\, f_n(x_1, \cdots, y_i, \cdots, y_j, \cdots, x_n) \qquad (30)
\end{aligned}$$

Dabei steht das y_i an der i-ten Stelle und das y_j an der j-ten Stelle in der Argument-Liste des f_n. Wegen

$$a_\beta a_\gamma^+ \;=\; a_\gamma^+ a_\beta \;+\; \delta_{\beta,\gamma} \qquad (31)$$

haben wir

$$a_\delta^+ a_\beta a_\gamma^+ a_\alpha f_n \;=\; a_\delta^+ a_\gamma^+ a_\beta a_\alpha f_n \;+\; \delta_{\beta,\gamma}\, a_\delta^+ a_\alpha f_n \qquad (32)$$

Aus (30) und (32) folgt dann offensichtlich

$$\begin{aligned}
(a_\delta^+ a_\gamma^+ a_\beta a_\alpha f_n)(x_1, \cdots, x_n) &= \\
\sum_{\substack{i,j=1 \\ i \neq j}}^n \sum_{y_i, y_j \in \Gamma} e_\delta(x_i)\, e_\gamma(x_j)\, \bar{e}_\beta(y_i)\, & \bar{e}_\alpha(y_j)\, f_n(x_1, \cdots, y_i, \cdots, y_j, \cdots, x_n) \qquad (33)
\end{aligned}$$

Damit erhalten wir die folgende Darstellung:

$$\begin{aligned}
(H_n^s f_n)(x_1, \cdots, x_n) &= \\
\sum_{\alpha\beta\gamma\delta} \langle \gamma, \delta | v | \alpha, \beta \rangle\, \tfrac{1}{2} & \sum_{\substack{i,j=1 \\ i \neq j}}^n \sum_{y_i, y_j} e_\gamma(x_i)\, e_\delta(x_j)\, \bar{e}_\alpha(y_i)\, \bar{e}_\beta(y_j)\; f_n(x_1, \cdots y_i \cdots y_j \cdots x_n) \\
= \tfrac{1}{2} \sum_{\alpha\beta\gamma\delta} \langle \gamma, \delta | v | \alpha, \beta \rangle\, & (a_\delta^+ a_\gamma^+ a_\beta a_\alpha f_n)(x_1, \cdots, x_n) \qquad (34)
\end{aligned}$$

Schreiben wir noch die antisymmetrische Version hin: Wir bekommen, jetzt mit $f_n \in L^2_a(\Gamma^n)$,

$$
\begin{aligned}
(c^+_\delta c_\beta [c^+_\gamma c_\alpha f_n])(x_1, \cdots, x_n) \;&=\; \sum_{i=1}^n \sum_{y_i\in\Gamma} e_\delta(x_i)\, \bar e_\beta(y_i)\, [c^+_\gamma c_\alpha f_n](x_1, \cdots, y_i, \cdots, x_n) \\
&= \sum_{i=1}^n \sum_{y_i\in\Gamma} e_\delta(x_i)\, \bar e_\beta(y_i) \sum_{\substack{j=1\\ j\neq i}}^n \sum_{y_j\in\Gamma} e_\gamma(x_j)\, \bar e_\alpha(y_j)\, f_n(x_1, \cdots, y_i, \cdots, y_j, \cdots, x_n) \\
&\quad + \sum_{i=1}^n \sum_{y_i\in\Gamma} e_\delta(x_i)\, \bar e_\beta(y_i) \sum_{z_i\in\Gamma} e_\gamma(y_i)\, \bar e_\alpha(z_i)\, f_n(x_1, \cdots, z_i, \cdots, x_n)
\end{aligned}
\tag{35}
$$

oder

$$
\begin{aligned}
(c^+_\delta c_\beta [c^+_\gamma c_\alpha f_n])(x_1, \cdots, x_n) \;&=\; \delta_{\beta,\gamma} \sum_{i=1}^n \sum_{z_i\in\Gamma} e_\delta(x_i)\, \bar e_\alpha(z_i)\, f_n(x_1, \cdots, z_i, \cdots, x_n) \\
&\quad + \sum_{i=1}^n \sum_{y_i\in\Gamma} e_\delta(x_i)\, \bar e_\beta(y_i) \sum_{\substack{j=1\\ j\neq i}}^n \sum_{y_j\in\Gamma} e_\gamma(x_j)\, \bar e_\alpha(y_j)\, f_n(x_1, \cdots, y_i, \cdots, y_j, \cdots, x_n) \\
&= \delta_{\beta,\gamma}\, (c^+_\delta c_\alpha f_n)(x_1, \cdots, x_n) \\
&\quad + \sum_{\substack{i,j=1\\ i\neq j}}^n \sum_{y_i, y_j\in\Gamma} e_\delta(x_i)\, e_\gamma(x_j)\, \bar e_\beta(y_i)\; \bar e_\alpha(y_j)\, f_n(x_1, \cdots, y_i, \cdots, y_j, \cdots, x_n)
\end{aligned}
\tag{36}
$$

Wegen

$$
c_\beta c^+_\gamma \;=\; -\, c^+_\gamma c_\beta \;+\; \delta_{\beta,\gamma}
\tag{37}
$$

haben wir

$$
c^+_\delta c_\beta c^+_\gamma c_\alpha f_n \;=\; -\, c^+_\delta c^+_\gamma c_\beta c_\alpha f_n \;+\; \delta_{\beta,\gamma}\, c^+_\delta c_\alpha f_n
\tag{38}
$$

Aus (36) und (38) folgt dann offensichtlich

$$
\begin{aligned}
&-\,(c^+_\delta c^+_\gamma c_\beta c_\alpha f_n)(x_1, \cdots, x_n) \;= \\
&\qquad \sum_{\substack{i,j=1\\ i\neq j}}^n \sum_{y_i, y_j\in\Gamma} e_\delta(x_i)\, e_\gamma(x_j)\, \bar e_\beta(y_i)\; \bar e_\alpha(y_j)\, f_n(x_1, \cdots, y_i, \cdots, y_j, \cdots, x_n)
\end{aligned}
\tag{39}
$$

Damit erhalten wir die folgende Darstellung (im f_n ist ein y_j immer an der j-ten Stelle, nicht an der i-ten, so ist die Notation zu verstehen):

$$
\begin{aligned}
&(H^a_n f_n)(x_1, \cdots, x_n) \\
&\overset{(26)}{=} \sum_{\alpha\beta\gamma\delta} \langle \gamma, \delta | v | \alpha, \beta\rangle\; \tfrac{1}{2} \sum_{\substack{i,j=1\\ i\neq j}}^n \sum_{y_i, y_j} e_\gamma(x_i)\, e_\delta(x_j)\, \bar e_\alpha(y_i)\, \bar e_\beta(y_j)\; f_n(x_1, \cdots y_i \cdots y_j \cdots x_n) \\
&\overset{\substack{\text{Umbe-}\\ \text{nennung}\\ i\leftrightarrow j}}{=} \sum_{\alpha\beta\gamma\delta} \langle \gamma, \delta | v | \alpha, \beta\rangle\; \tfrac{1}{2} \sum_{\substack{i,j=1\\ i\neq j}}^n \sum_{y_i, y_j} e_\gamma(x_j)\, e_\delta(x_i)\, \bar e_\alpha(y_j)\, \bar e_\beta(y_i)\; f_n(x_1, \cdots y_j \cdots y_i \cdots x_n) \\
&\overset{(39)}{=} -\, \tfrac{1}{2} \sum_{\alpha\beta\gamma\delta} \langle \gamma, \delta | v | \alpha, \beta\rangle\, (c^+_\delta c^+_\gamma c_\beta c_\alpha f_n)(x_1, \cdots, x_n)
\end{aligned}
\tag{40}
$$

oder

$$H_n^a \;=\; +\tfrac{1}{2} \sum_{\alpha\beta\gamma\delta} \langle \gamma, \delta | v | \alpha, \beta \rangle \; c_\gamma^+ c_\delta^+ c_\beta c_\alpha \tag{41}$$

Fassen wir die Resultate in dem folgenden Theorem zusammen:

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

$$h \;:\; L^2(\Gamma) \;\to\; L^2(\Gamma) \tag{42}$$

$$v \;:\; L^2(\Gamma^2) \;\to\; L^2(\Gamma^2) \tag{43}$$

Wir definieren den n-Teilchen-Operator

$$H_n \;=\; \sum_{i=1}^{n} h_i \;+\; \tfrac{1}{2} \sum_{\substack{i,j=1 \\ i\neq j}}^{n} v_{ij} \;\;:\;\; L^2(\Gamma^n) \;\to\; L^2(\Gamma^n) \tag{44}$$

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

$$(h_i f_n)(x_1, \cdots, x_n) \;=\; \sum_{\alpha,\beta} \sum_{y_i \in \Gamma} e_\beta(x_i) \; \langle \beta | h | \alpha \rangle \; \bar{e}_\alpha(y_i) \; f_n(x_1, \cdots, y_i, \cdots, x_n) \tag{45}$$

$$(v_{ij} f_n)(x_1, \cdots, x_n) \;=\; \tag{46}$$
$$\sum_{\alpha\beta\gamma\delta} \sum_{y_i, y_j} e_\gamma(x_i)\, e_\delta(x_j) \; \langle \gamma, \delta | v | \alpha, \beta \rangle \; \bar{e}_\alpha(y_i)\, \bar{e}_\beta(y_j) \; f_n(x_1, \cdots y_i \cdots y_j \cdots x_n)$$

mit den Matrix-Elementen

$$\langle \beta | h | \alpha \rangle \;:=\; (e_\beta, h e_\alpha) \tag{47}$$

$$\langle \gamma, \delta | v | \alpha, \beta \rangle \;:=\; (\, e_\gamma \otimes e_\delta \,,\; v \; e_\alpha \otimes e_\beta \,) \tag{48}$$

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,

$$H_n^s \;:=\; H_n \big|_{L_s^2(\Gamma^n)} \tag{49}$$

$$H_n^a \;:=\; H_n \big|_{L_a^2(\Gamma^n)} \tag{50}$$

Dann gelten die folgenden Darstellungen:

$$H_n^s \;=\; \sum_{\alpha,\beta} a_\beta^+ \; \langle \beta | h | \alpha \rangle \; a_\alpha \;\;+\;\; \tfrac{1}{2} \sum_{\alpha\beta\gamma\delta} a_\gamma^+ a_\delta^+ \; \langle \gamma, \delta | v | \alpha, \beta \rangle \; a_\beta a_\alpha \tag{51}$$

$$H_n^a \;=\; \sum_{\alpha,\beta} c_\beta^+ \; \langle \beta | h | \alpha \rangle \; c_\alpha \;\;+\;\; \tfrac{1}{2} \sum_{\alpha\beta\gamma\delta} c_\gamma^+ c_\delta^+ \; \langle \gamma, \delta | v | \alpha, \beta \rangle \; c_\beta c_\alpha \tag{52}$$

mit den Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren aus der Definition 8.1.