V.3 Quantisierung des Materiefelds

Ziel: Wieder Elektronen aus einem Grundzustand erzeugen und vernichten.
Auch WW mit Teilchenerzeugung und -vernichtung darstellen.

Startpunkt Lagrangefkt für das klassische Wellenfeld!

$$L = \int \psi^* \left(i\hbar \dot{\psi} - V(r)\psi + \frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi \right) d^3r \Leftarrow \text{Achtung nicht hermitesch}$$

ψ, ψ^* sind voneinander unabhängig (Alternativ Real und Imaginärteil).

Bildung der Lagrangegl.:

$$\frac{d}{dt} \frac{\delta L}{\delta \dot{\psi}^*} - \frac{\delta L}{\delta \psi^*} = -\left(i\hbar \dot{\psi} - V(r)\psi - \frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi \right) = 0$$

$\Leftarrow$ Schrödingergl.!

Der kanonische Impuls ist

$$\| \; \Pi = \frac{\delta L}{\delta \dot{\psi}} = -\frac{\hbar}{i} \psi^* \; \|$$

Die Hamiltonfkt. kann mit der Hilfe einer Legendretransformation berechnet werden.

$$H = \int (\Pi \dot{\psi} - \mathcal{L}) dr^3 = \int \left(i\hbar \dot{\psi} \psi^* - i\hbar \psi^* \dot{\psi} - \psi^* \frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi + \psi^* V(r) \psi \right) d^3r$$

$$\| \; H = \int \psi^*(r) \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(r) \right) \psi(r) \, d^3r \; \|$$

Wichtig Unterschied Hamiltonfunktion und Hamiltonoperator

Wir können natürlich die Wellenfunktion nach EV $\varphi_\nu(\underline{r})$ des Hamiltonoperators entwickeln

$$\psi(\underline{r}) = \sum_\nu a_\nu \, \varphi_\nu(\underline{r}) \qquad \text{mit } a_\nu(t) = e^{-\frac{i}{\hbar} E_\nu t}$$

$$\psi^\times(\underline{r}) = \sum_\nu a_\nu^\times \, \varphi_\nu^\times(\underline{r}) \qquad a_\nu,\ a_\nu^\times \text{ sind Entwicklungskoeffizienten!}$$

Wir postulieren jetzt Vertauschungsrelationen:

Bosonen

$$[\pi^\times(\underline{r}), \psi^+(\underline{r}')]_- = \frac{\hbar}{i}\,\delta(\underline{r}-\underline{r}') \qquad \text{sowie } [\psi(\underline{r}), \psi(\underline{r}')]_- = 0$$

$$\Downarrow \qquad\qquad \text{und}$$

$$[\psi(\underline{r}), \psi^+(\underline{r}')]_- = \delta(\underline{r}-\underline{r}') \qquad [\psi^+(\underline{r}), \psi^+(\underline{r}')]_- = 0$$

sind Heisenbergoperatoren

$$\psi(\underline{r}) = \sum_\nu a_\nu \, \varphi_\nu(\underline{r}) \qquad | \cdot \varphi_{\nu'}^\times(\underline{r}) \qquad | \int d\underline{r}$$

$$\int d\underline{r}\; \varphi_{\nu'}^\times(\underline{r})\, \psi(\underline{r}) = \sum_\nu a_\nu \underbrace{\int d\underline{r}\; \varphi_{\nu'}^\times(\underline{r})\, \varphi_\nu(\underline{r})}_{\delta_{\nu\nu'}} = a_{\nu'}$$

$$\Rightarrow \qquad a_{\nu'} = \int d\underline{r}\; \varphi_{\nu'}^\times(\underline{r})\, \psi(\underline{r})$$

analog $\quad a_{\nu'}^+ = \int d\underline{r}\; \varphi_{\nu'}(\underline{r})\, \psi^+(\underline{r})$

Damit Kommutatoren berechnen

$$[a_\nu, a^+_{\nu'}]_- = \int dx \int dx' \, \varphi_{\nu'}(x)\, \varphi^*_\nu(x') \underbrace{[\psi(x), \psi^+(x')]_-}_{\delta(x-x')}$$

$$= \int dx \; \varphi_{\nu'}(x)\, \varphi^*_\nu(x) = \delta_{\nu\nu'}$$

$\Rightarrow [a_\nu, a^+_{\nu'}]_- = \delta_{\nu\nu'}$ analog $[a_\nu, a_{\nu'}]_- = [a^+_\nu, a^+_{\nu'}]_- = 0$

Grund: Im Prinzip sind $\psi(x), \psi^+(x)$ Erzeuger und Vernichter der Ortsbasis und a_ν, a^+_ν der Energieeigenbasis. Bei Basistransformationen bleiben Kommutatorrelationen invariant.

<u>Problem bei Elektronen</u>

$$a^+_\nu a^+_\nu |\phi_0\rangle \neq 0,$$ man kann beliebig Teilchen erzeugen!

Aber für Elektronen gilt das Pauli Prinzip, man darf nur ein Elektron pro Quantenzustand besetzen.

Für Elektronen sollte

$$a^+_\nu a^+_\nu |\phi_0\rangle = 0$$ (eigentlich für jeden Zustand)

bel. Zustand $|\phi\rangle$: $a^+_\nu a^+_\nu |\phi\rangle = 0 \Rightarrow a^+_\nu a^+_\nu = 0$

Bei Fermionen gelten $[a_\nu, a^+_{\nu'}]_+ = \delta_{\nu\nu'}$ $\quad ([A,B]_+ = AB + BA)$

$$[a_\nu, a_{\nu'}]_+ = [a^+_\nu, a^+_{\nu'}]_+ = 0$$

weil $a^+_\nu a^+_\nu = -a^+_\nu a^+_\nu \Rightarrow 2 a^+_\nu a^+_\nu = 0$

Also bei Fermionen gelten + Kommutatoren bei Quantisierung des Schrödingerschen Wellenfeldes!

Wegen unitärer Transformation gilt dann auch: (Für Fermionen!)

$$[\psi(\underline{r}), \psi^+(\underline{r}')]_+ = \delta(\underline{r}-\underline{r}')$$

$$[\psi(\underline{r}), \psi(\underline{r}')]_+ = [\psi^+(\underline{r}), \psi^+(\underline{r}')]_+ = 0$$

Formulierung des Hamiltonoperators

$$H = \int \psi^+(\underline{r}) \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(\underline{r})\right) \underbrace{\psi(\underline{r})}_{\sum_\nu \varphi_\nu(\underline{r})\, a_\nu} d^3\underline{r} = \sum_\nu E_\nu\, a_\nu^+ a_\nu$$

Postulat Vakuumzustand:

$$a_\nu |\phi_0\rangle = 0 \quad \text{für alle } \nu.$$

Bosonen

Fock Zustände

$$|\{n_i\}\rangle = \prod_\nu \frac{1}{\sqrt{n_\nu!}} (a_\nu^+)^{n_\nu} |\phi_0\rangle$$

Hier $n_\nu = 0, 1, \dots, \infty$

Fermionen

Fock Zustände

$$|\{n_i\}\rangle = \prod_\nu (a_\nu^+)^{n_\nu} |\phi_0\rangle$$

$n_\nu = 0, 1$

VII. Elektron-Elektron-Wechselwirkung

VII.1 Jellium Modell

Einfaches Modell für Alkalimetalle:

Jellium (Jelly ist Marmelade)

Idee: Ionen bilden positiven Hintergrund für Elektronen.

(Daher geeignet für schwach gebundene Elektronen)

Startpunkt: Klassische Hamiltonop. der Coulomb Wechselwirkung

$$H_C = \frac{1}{2} \sum_{\alpha,\alpha'} \int d\mathbf{r} \int d\mathbf{r}' \underbrace{\rho_\alpha(\mathbf{r})}_{\text{Ladungsdichte}} \rho_{\alpha'}(\mathbf{r}') \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 |\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}$$

α kann Ion oder Elektron sein!

$$\rho_e(\mathbf{r}) = (-e) \sum_{i=1}^{N} \delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}_i)$$ der Elektronen.

und konstanten Hintergrund.

$$\rho_i(\mathbf{r}) = (+e)\,\frac{N}{V}$$ (N Anzahl der Ladungen)

Wir führen eine Fouriertransformation durch:

$$H_C = \frac{V^2}{2} \sum_{\alpha,\alpha',q} W_q \, \rho_{\alpha,-q} \, \rho_{\alpha',q} \, .$$

mit
$$\rho_{e,q} = -\frac{e}{V} \sum_{i=1} e^{-i q\cdot r_i}$$

und $\rho_{i,q} = \frac{eN}{V} \cdot \delta_{q,0}$ ← Konstanter Ladungshintergrund.

Wir teilen jetzt die Beiträge auf!

$$H_C = H_C^{e-e} + H_C^{e-i} + H_C^{i-i}$$

$$H_C^{e-e} = \frac{e^2}{2} \sum_{i,j,q} W_q \, e^{i q (r_i - r_j)}$$

$$= \frac{e^2}{2} \Big(\sum_{i,j,q \neq 0} W_q \, e^{i q \cdot (r_i - r_j)} + \underbrace{W_{q=0} N^2}_{\text{Durchschnittsbeitrag der Elektron-Elektron-wechselwirkung bei gleichmäßiger Verteilung der Elektronen}} \Big)$$

Anzahl der Elektronen

$$H_C^{e-i} = -\frac{e^2}{2} \sum_{i,q} W_q N \delta_{q,0} \Big(\underbrace{e^{i q \cdot r_i}}_{\rho_{e,-q}} + \underbrace{e^{-i q \cdot r_i}}_{\rho_{e,q}} \Big) = -e^2 W_{q=0} N^2$$

$$H_C^{i-i} = \frac{e^2}{2} W_{q=0} N^2$$

Wir addieren jetzt alle Beiträge auf

$$\boxed{H_C = \frac{e^2}{2} \sum_{i,j \neq i, q \neq 0} W_q \, e^{i q \cdot (r_i - r_j)}}$$

⟸ Coulomb Ham Op im Jellium Modell

$q = 0$ fällt wegen konstantem Ionenbackground weg!

$$\sum_{\substack{i, j \neq i \\ q \neq 0}} W_q \, e^{i q (r_i - r_j)} = \sum_{i, q \neq 0} W_q \, e^{i q \cdot r_i} \sum_{j \neq i} e^{-i q \cdot r_j} = \sum_{i, q \neq 0} W_q \, e^{i q \cdot r_i} \Big(\sum_j e^{-i q \cdot r_j} \underbrace{- e^{-i q \cdot r_i}}_{\text{Selbst-WW abziehen}} \Big)$$

$$= \sum_{i,j,q \neq 0} W_q \, e^{i q (r_i - r_j)} - N \sum_{q \neq 0} W_q$$

$$\Rightarrow \boxed{H_C = \frac{1}{2} \sum_{q \neq 0} W_q \left(e^2 \rho_{e,-q} \rho_{e,q} - e^2 N \right)}$$

Coulomb Hamilton Operator des Jellium Modells

TODO: Übergang zur Quantenfeldtheoretischen Darstellung, ersetze Größen durch Operatoren.

$$\rho_{e,-q} \to \hat\rho_{e,-q} \qquad N \to \hat N \Leftarrow \text{Elektronenzahloperator.}$$

$$H_C = \frac{1}{2}\sum_{q\neq 0} V_q \left(V^2 \, 1 \, \hat\rho_{e,-q}\, \hat\rho_{eq} - e^2 \hat N \right)$$

$\hat\rho_{e-q}$:

$$\underbrace{\hat\rho_e(\underline{r})}_{\text{Ortsabhängige Ladungsdichte}} = -e\,\underbrace{\hat n(\underline{r})}_{\text{Teilchenzahldichte}} = -e \sum_s \psi_s^+(\underline{r})\,\psi_s(\underline{r})$$

Teilchenzahldichte ≙ Produkt der Wellenfkt. $\psi_s^*(\underline{r})\,\psi_s(\underline{r})$

durch Heisenberg operatoren ersetzen.

$$\rho_{e,-q} = \int d\underline{r}\; e^{i\underline{q}\cdot\underline{r}}\,\rho_e(\underline{r}) = -e\int d\underline{r}\; e^{i\underline{q}\cdot\underline{r}} \sum_s \psi_s^+(\underline{r})\,\psi_s(\underline{r})$$

Weiterhin ist

$$\hat N = \int d\underline{r}\; \hat n(\underline{r}) = \int d\underline{r} \sum_s \psi_s^+(\underline{r})\,\psi_s(\underline{r})$$

Wir nehmen jetzt freie Elektronen an: (ebene Wellen)

Dann ist:

$$\psi_s(\underline{r}) = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\underline{k}} a_{\underline{k},s}\, e^{i\underline{k}\cdot\underline{r}}$$

$$\hat\rho_{e,-q} = -e \sum_{k,k',s} \underbrace{\frac{1}{V}\int_V d\underline{r}\; e^{i\underline{q}\cdot\underline{r}}\; a^+_{k's}\, a_{k,s}\; e^{i(\underline{k}-\underline{k}')\underline{r}}}_{\delta_{\underline{k}-\underline{k}',-q}}$$

$$\hat\rho_{e,-q} = -\frac{e}{V}\sum_{\underline{k},s} a^+_{\underline{k}+\underline{q},s}\; a_{\underline{k},s}$$

Einsetzen in H_C

$$H_C = \frac{1}{2}\sum_{\substack{kk'\\ q\neq 0,ss'}} V_q\, a^+_{\underline{k}+\underline{q},s}\, a_{\underline{k},s}\, a^+_{\underline{k}'-\underline{q},s'}\, a_{\underline{k}',s'} - \frac{1}{2}\cdot 2 \sum_{q\neq 0}\sum_{\underline{k},s} a^+_{\underline{k},s}\, a_{\underline{k},s}\, V_q$$

$$V_q = e^2 \, W_q$$

Vergleich $\quad V_q = \frac{e^2}{\varepsilon_0 V} \frac{1}{q^2}$ $\qquad$ Für WW Ham.-Op in Normalordnung.