

4.) Quantisierung des Schrödingerfelds:

nichtrelativistische Fermionen / Bosonen mit Masse m

a) Quantisierung lt. Vorschrift

$$i\hbar \dot{\psi}_s(\mathbf{r}, t) = \underline{H}_s \psi_s(\mathbf{r}, t) \Rightarrow \underline{H} = \int d^3r \psi_s^\dagger(\mathbf{r}, t) \underline{H}_s \psi_s(\mathbf{r}, t)$$

$$\dot{\psi}_s(\mathbf{r}, t) = \frac{i}{\hbar} [\underline{H}, \psi_s(\mathbf{r}, t)]$$

Die Heisenberg Bewegungsgleichung bestimmt die Dynamik.

b) Modenterwicklung

Eigenfunktionen für 1 Teilchen Schrödinger Gleichung

$$\underline{H}_s = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + U(\mathbf{r}), \quad \psi = \sum_{\lambda} \underline{a}_{\lambda}(t) u_{\lambda}(\mathbf{r})$$

$$\text{aus } \underline{H}_s u_{\lambda} = \varepsilon_{\lambda} u_{\lambda} \quad \uparrow \text{ Operatorcharakter}$$

$$\text{Werte gezipft } (\psi_s \rightarrow \underline{\psi}, \underline{H}_s \rightarrow \underline{H})$$

$$\underline{H} = \sum_{\lambda} \hbar \omega_{\lambda} a_{\lambda}^{\dagger} a_{\lambda} \quad (\underline{a}_{\lambda} \rightarrow a_{\lambda})$$

$$[a_{\lambda}, a_{\lambda'}^{\dagger}]_{\pm} = \delta_{\lambda\lambda'}, \quad \dot{a}_{\lambda} = \frac{i}{\hbar} [\underline{H}, a_{\lambda}] = -i \omega_{\lambda} a_{\lambda}$$

$$[a_{\lambda}^{(+)}, a_{\lambda'}^{(+)}]_{\pm} = 0$$

In Analogie zum harmonisch Oszillator (Kapitel 1) liegen $n_{\lambda} = \langle a_{\lambda}^{\dagger} a_{\lambda} \rangle$ Quanta vor. Offensichtlich liegt bereits eine Vielteilchen-Korrelatur vor, allerdings bisher \exists keine Wechselwirkung zwischen den Oszillatoren.
(\sum_{λ} über unabhängige Oszillatoren)

c) QFT-Observablen \underline{O}

wird als Reaktion des Systems (\underline{H}) auf eine Änderung eines externen Felds $U_j(r, t)$ definiert

$$\underline{O} = \frac{\delta \underline{H}}{\delta U_j(r, t)}$$

$$= \frac{\delta}{\delta U_j(r, t)} \left(\int d^3r' \underline{\varphi}^{\dagger}(r', t) U_j(r', t) \underline{\varphi}(r', t) \right)$$

$$= \underline{\psi}^\dagger(r, t) \underline{\psi}(r, t) \delta_{ij}$$

In unserm Bsp ist die Observable die Ladungsdichte

d) Erwartungswerte $\langle \psi | \underline{Q} | \psi \rangle$

werden abstrakt im bra-ket Formalismus
geschrieben und werden gleich bestimmt:

Eigenfunktionen von \underline{H}

4.1. Energieeigenwertproblem f. ein Feldmode

behandel Fermionen und Bosonen:

$$\text{lösen: } a_\lambda^\dagger a_\lambda |n_\lambda\rangle = n_\lambda |n_\lambda\rangle$$

Quantenzahl der Zustände sind n_λ und diese
sind zu bestimmen

Fermionen:

$$a_\lambda a_\lambda^\dagger + a_\lambda^\dagger a_\lambda = 1$$

Bosonen

a) Die einzig mögl. Werte f. n_λ sind 0, 1. $[a_\lambda, a_\lambda^\dagger]_+ = 1$

$$\underbrace{a_\lambda^\dagger a_\lambda a_\lambda^\dagger a_\lambda}_{\underline{u}_\lambda^2} = a_\lambda^\dagger \left(\overset{\uparrow}{1 - a_\lambda^\dagger a_\lambda} \right) a_\lambda = \underbrace{a_\lambda^\dagger a_\lambda}_{\underline{u}_\lambda} + 0$$

$\underline{u}_\lambda^2 = \underline{u}_\lambda$, zweiter Term $a_\lambda^\dagger a_\lambda^\dagger a_\lambda a_\lambda$ ist Null,

weil $\underbrace{a_\lambda^\dagger a_\lambda^\dagger + a_\lambda^\dagger a_\lambda^\dagger}_{\underline{u}_\lambda^2} = 0$

$$a_\lambda^\dagger a_\lambda^\dagger = -a_\lambda^\dagger a_\lambda^\dagger \Rightarrow 0$$

$$a_\lambda a_\lambda = -a_\lambda a_\lambda \Rightarrow 0$$

$$\underline{u}_\lambda^2 |u_\lambda\rangle = \underline{u}_\lambda |u_\lambda\rangle$$

$$u_\lambda \underline{u}_\lambda |u_\lambda\rangle = u_\lambda |u_\lambda\rangle$$

$$u_\lambda u_\lambda |u_\lambda\rangle = u_\lambda |u_\lambda\rangle$$

$$\rightarrow u_\lambda^2 = u_\lambda \Rightarrow u_\lambda = 0, u_\lambda = 1$$

mgf. Lösung

Die einzig mögl. Besetzungszahl f. Fermionenzustände sind $u_\lambda = 0, 1$, spiegelt das Pauliprinzip wider, ist also in Vertauschungsrelation bereits enthalten.

b) Die Eigenfunktionen zu $u_x = 0, 1$, also $|0\rangle, |1\rangle$
sind mit $a_x^+ |0\rangle = |1\rangle$ gegeben:

- für $u_x = 0$ sei $|0\rangle$ der Eigenzustand

$$- \underline{u_x a_x^+ |0\rangle} \stackrel{?}{=} a_x^+ a_x a_x^+ |0\rangle$$

$$= a_x^+ (1 - a_x^+ a_x) |0\rangle = \underline{a_x^+ |0\rangle} + 0$$

$$\rightarrow \underline{u_x (a_x^+ |0\rangle)} = 1 (a_x^+ |0\rangle)$$

vergleiche $u_x |1\rangle = 1 |1\rangle$

$$\rightarrow a_x^+ |0\rangle = |1\rangle$$

Zusammenfassg. Formeln

a) $u_x = 0, 1$ (Puliprinzip)

Es gilt nur 1 oder kein Tildchen in Mode 1

b) $|u_x\rangle \rightarrow |0\rangle, |1\rangle$

ϵ gilt da unbesetzt und da besetzte Zustand

c) Gesamtproblem d. Fermionen

$$\underline{H} |\psi\rangle = E |\psi\rangle, \quad \underline{H} = \sum_{\lambda} \epsilon_{\lambda} a_{\lambda}^{\dagger} a_{\lambda}$$

$$|\psi\rangle = \prod_{\lambda} |u_{\lambda}\rangle, \quad (2. \text{Niveau: } |u_1\rangle |u_2\rangle)$$

$$E = \sum_{\lambda} \epsilon_{\lambda} u_{\lambda}$$

weil es sich um unabhängige Oszillatoren handelt

Bosonen: Minimumprinzip. Brich beim harmonisch Oszillator verwendet

$$[a_{\lambda}, a_{\lambda'}^{\dagger}]_{-} = \delta_{\lambda\lambda'}, \quad [a_{\lambda}^{(\pm)}, a_{\lambda'}^{(\pm)}]_{-} = 0$$

Ergebnisse können direkt übernommen werden:

a) $u_{\lambda} = 0, 1, 2, 3, \dots$

Es gilt keine Beschränkung bei Besetzung bosonischer Zustände

b) $|u_{\lambda}\rangle \rightarrow |0\rangle, |u_{\lambda}\rangle = \frac{1}{\sqrt{u_{\lambda}!}} (a_{\lambda}^{\dagger})^{u_{\lambda}} |0\rangle$

c) Gesamtproblem wird analog Fermion gelöst

4.2. Interpretation des Gitter-Teilchenproblems

- technisch: a^\dagger, a leichter zu handhaben als die entsprechende Vielteilchen Schrödingerwellenfunktion
- $|n_\lambda\rangle$ ist Zustand der den Besetzungsgrad der λ -te Feldmode mit n_λ -Teilchen beschreibt
- Jedes Schrödingerfeld kann als Besetzung / Ausgung einer Feldmode beschrieben werden

Elektronen sind die Modi eines Fermi-Schrödingerfelds

- Später: Photonen sind die Modi des elektromagnet. Felds

- Allgemeinsten Zustand mit N Teilchen

$$| \Psi_N \rangle = \sum_{\{n_\lambda\}} C_{\{n_\lambda\}} \prod_{\lambda} | n_\lambda \rangle$$

\uparrow
 N -Teilchen

\uparrow
 $\{n_\lambda\}$
 \uparrow
Summe über alle Möglichkeiten
 N Teilchen auf die besetzten

\uparrow
Gewicht mit dem vorkommt
bzw.

Mode $|u_\lambda\rangle$ zu vertikal

Interpretation von $\underline{\psi}^\dagger(r,t)$, $\underline{\psi}(r,t)$:

$$|N\rangle = \sum_{\{u_\lambda\}} C(\{u_\lambda\}) \prod_{\lambda} (a_{\lambda}^\dagger)^{n_\lambda} |0\rangle$$

Fermionen

$|0\rangle$
Vakuum,
keine Teilchen in
Mode

$$a_{\lambda}^\dagger = \int d^3r \underline{\psi}^\dagger(r,t) u_{\lambda}(r)$$

man sieht nach Einsetzen, daß $\underline{\psi}^\dagger(r,t)$
auf dem Vakuum die Stelle bei
 (r,t) erzeugt \rightarrow Heisenberg erzeugter $\underline{\psi}^\dagger$

5) Wechselwirkende Quantenfelder I:

Die Kopplung zwischen Elektronen und

Molekül / Festkörper Schwingungen

betraachte 1 Molekül mit Kernkoordinaten $\{K\}$

und Elektronen koordinate $\{i\}$, Kapitel V

in Born-Oppenheimer Näherung:

$$1) \left(T_{el} + \cancel{V_{el-el}} + V_{el-k} \right) \varphi_e(i, k) = E_{el}^e(k) \varphi_e(i, k)$$

↑ ↑ ↑ ↑ ↑
kinetisch Ein-Elektron- Elektron im Elektronische Wellenfkt der
 Theorie Feld der Kerne Energie Elektronen

Schrodingergleichung f. Elektronen bei festgehaltenen Kernen

l bezeichnet Quantenzahl, wenn lösbar

$$2) \left(T_k + V_{k-k} + E_{el}^e(k) \right) \chi_e(k) = E^e(k) \chi_e(k)$$

↑ ↑ ↑ ↑
kinetische Energie Kern-Kern Abstößg. Beitrag des elektronischen Potentials

Schrodingergleichung f. Kerne im mittleren Elektronenpotential

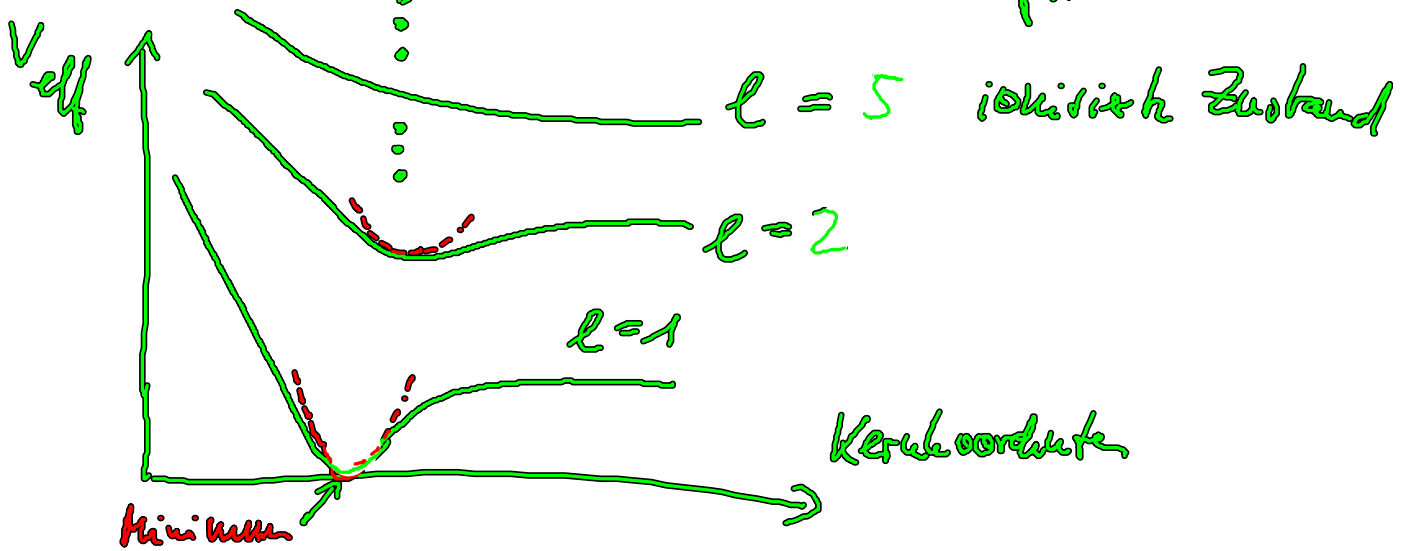
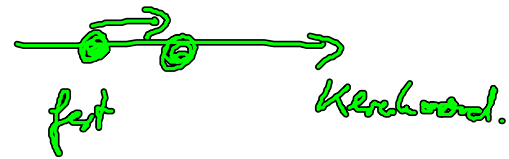
$\chi_e(k)$ bewegt sich in effektivem Potential

$$V_{eff}^e = V_{k-k} + E_{el}^e(k)$$

$E_e(k)$ ist Gesamtenergie und muß in V_{eff}

mit einbezogen werden um stabile Kernkonfigurationen zu ergeben:

a) Effektives Potential



beschränke uns auf kleine Auslenkungen
und mache harmonische Näherung und
Normal mode analyse

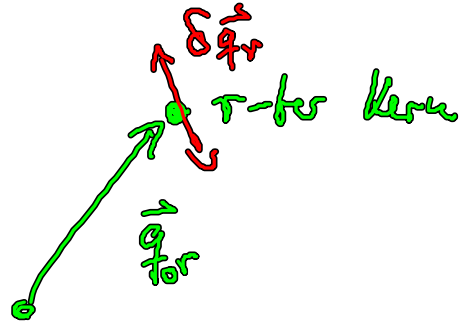
Die N Kerne bilden dann ein komplexes

Schwingungsfähiges System mit $3N - 6$ Freiheitsgraden

Siehe Mechanik (Normalmode" Kapitel SS 2006)

analoge Notation $\{k\} \quad \vec{q}_r = \vec{q}_{or} + \delta \vec{q}_r$

Die Lagekoordinate \vec{q}_r des r -ten Kerns werde um



Ruhelage \vec{q}_r und eine
kleine Auslenkung $\delta \vec{q}_r$
 $\{\vec{q}_r\} \rightarrow q_i \quad i = 1 - 3N$

$$V_{\text{eff}}^e = V_{\text{eff}}^e(\text{Ruhelage} = q_{r0i}) + \frac{1}{2!} \sum_{ij} \frac{\partial^2 V_{\text{eff}}^e}{\partial q_i \partial q_j} \bigg|_{\text{Ruhelage}} \delta q_i \delta q_j$$

1. Term Taylor = 0, weil Minimum

Trick der Normalmodanalyse ist nicht diagonale Form
zu bereinigen:

$$H = T_k + V_{\text{eff}}(k) = \sum_{\alpha} \left(\frac{p_{\alpha}^2}{2m_{\alpha}} + \frac{\omega_{\alpha}^2 m_{\alpha}}{2} y_{\alpha}^2 \right) + V_{\text{eff}}^e \bigg|_{\text{Ruhelage}}$$

Es entstehen ungeschoppelt Oszillatoren mit

Impuls p_{α} und Lage y_{α}

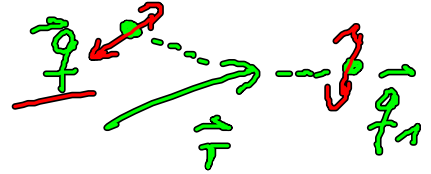
$$\delta \vec{q}_m = \sum_{\alpha} y_{\alpha}(t) \vec{g}_{\alpha m}, \quad \ddot{y}_{\alpha} + \omega_{\alpha}^2 y_{\alpha} = 0$$

$\vec{g}_{\alpha m}$ sind die Eigenvektoren der diagonalisierten

Hess - Matrix V_{eff}''

b) Elektron-Kern-Wechselwirkung für kleine

Auslenkungen



$$V_{e-k}(i, k) = \sum \frac{-ze^2}{m |\vec{r} - \vec{q}_m|}$$

Coulomb zw. Kern und Elektron

$$= V_{e-k}(\text{Ruhelage } q_{m0})$$

$$+ \sum_m \frac{\delta \vec{q}_m \cdot \vec{\nabla}_{\vec{r}} V_{e-k}}{q_{m0}} \hat{=} *$$

↑
durch q_α ersetzen

c) Quantisierung im QFT-Formalismus

Gesamthamiltonian:

$$\begin{aligned}
 & \underline{T_{el}} + \underbrace{V_{el-k}(q_{m_0})}_{\text{Ruhelage}} + V_{el-k}^{\delta q} + T_k + \underbrace{V_{k-k}(q_{m_0})}_{+ V_{k-k}^{\delta q^2}} \\
 & \hspace{15em} * \hspace{15em} \text{(Oszillatoren } \delta q_i, \delta q_j)
 \end{aligned}$$

$$\underline{H}_{\text{elektronisch}} = \int d^3r \underline{\psi}^\dagger(r, t) \left(\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V_{el-k}(q_{m_0}) + V_{k-k}(q_{m_0}) \right) \underline{\psi}(r, t)$$

$$\text{Moden} = \sum_e \left(\underline{E}_{el}^e + V_{k-k}(q_{m_0}) \right) a_e^\dagger a_e$$

$$\underline{H}_{\text{Kern}} = \sum_\alpha \hbar \omega_\alpha b_\alpha^\dagger b_\alpha$$

$$\begin{aligned}
 \underline{H}_{\text{el-k}} &= \int d^3r \underline{\psi}^\dagger(r, t) V_{el-k}^{\delta q}(q_{m_0}) \underline{\psi}(r, t) \\
 & (*)
 \end{aligned}$$

$$= \sum_{e, e', \alpha} a_{e'}^\dagger a_e \sqrt{g_\alpha}^{ee'} (b_\alpha + b_\alpha^\dagger)$$

$$\text{aus } \gamma_\alpha = \left(\frac{\hbar}{2m_{el}} \right)^{1/2} (b_\alpha^\dagger + b_\alpha)$$

$$H = \sum_e \varepsilon_e a_e^\dagger a_e + \sum_\alpha \hbar \omega_\alpha b_\alpha^\dagger b_\alpha$$

elektronisches System
Oszillatoren der Kernbeweg.

$$+ \sum_{e,\alpha} a_e^\dagger a_e (b_\alpha^\dagger + b_\alpha) \hbar g_{e\alpha}$$

Kopplg. zwischen Kernoszillationen + Elektronen
 $(g_{\alpha}^{ee'} = \delta_{ee'} g_{\alpha}^{ee})$

Phonon: Schwingungsquanten der Kernschwingungen