5) Hamiltonfunktion für das wechselwirkende Schrödinger- und Maxwellfeld

Übergang von $L = \int d^3r\, \mathcal{L}$ nach $H = \int d^3r\, \mathcal{H}$

$$\mathcal{H} = \sum_\alpha \dot{\phi}_\alpha \Pi_\alpha - \mathcal{L} \,, \quad \Pi_\alpha = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \phi_{\alpha t}}$$

(analog zur Punktmechanik: $H = \sum_\alpha \dot{q}_\alpha p_\alpha - L$)

$$\phi_\alpha = (\psi, \psi^*, \phi, A_x, A_y, A_y)$$

$$\Pi_\alpha = \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\psi}}, \ldots \right)$$

$$\mathcal{L} = \frac{1}{2m}\left(\frac{\hbar}{i}\vec{\nabla} + q\vec{A}\right)\psi^*\left(\frac{\hbar}{i}\vec{\nabla} - q\vec{A}\right)\psi - \psi^*(q\phi + U)\psi$$

$$- \frac{i\hbar}{2}\left(\psi^*_{,t}\psi - \psi^*\psi_{,t}\right) \quad \rightarrow \frac{1}{2m}\psi^*\left(-\frac{\hbar}{i}\vec{\nabla} + q\vec{A}\right)\left(\frac{\hbar}{i}\vec{\nabla} - q\vec{A}\right)\psi$$

$$+ \frac{\varepsilon_0}{2}\left((\vec{\nabla}\phi)^2 + 2\vec{\nabla}\phi\cdot\dot{\vec{A}} + (\partial_t\vec{A})^2\right)$$

$$- \frac{1}{2\mu_0}(\vec{\nabla}\times\vec{A})^2 \qquad \vec{\nabla}\cdot\dot{\vec{A}} \rightarrow 0$$

---- zusammen fassen

—— umformen durch partielle Integration

$$\int d^3r \left(-\psi^* q \phi \psi + \frac{\varepsilon_0}{2} (\vec{\nabla}\phi)^2 \right) =$$

$$-\int d^3r\, \psi^* q \phi \psi - \frac{\varepsilon_0}{2} \int d^3r\, \phi \Delta \phi$$

(— von partieller Integration)

$$= -\int d^3r\, \psi^* q \phi \psi + \frac{\varepsilon_0}{2} \int d^3r\, \phi \frac{\rho}{\varepsilon_0}$$

$$= -\int d^3 \psi^* q \phi \psi + \frac{1}{2} \int d^3r\, \phi q \psi^* \psi$$

$$= -\frac{1}{2} \int d^3r\, \psi^* q \phi \psi$$

zur H zu bestimmen, werden Π_α benötigt:

$$\Pi_\psi = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\psi}} = \frac{i\hbar}{2} \psi^*, \quad \Pi_{\psi^*} = -\frac{i\hbar}{2} \psi$$

$$\Pi_\phi = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\phi}} = 0 \quad , \quad \Pi_{\vec{A}} = \varepsilon_0 \partial_t \vec{A}$$

$$= -\varepsilon_0 \vec{E}_T = -\vec{D}_T$$

Bestimmung der H-Funktion

nach $\mathcal{H} = \sum_\alpha \dot{\phi}_\alpha \Pi_\alpha - \mathcal{L}$

$$H = \int d^3r\, \psi^*(r,t) \frac{\left(\frac{\hbar}{i}\vec{\nabla} - q\vec{A}\right)^2}{2m} \psi(r,t) \qquad (1)$$

$$+ \frac{1}{2} \int d^3r \int d^3r' \frac{q^2}{4\pi\varepsilon_0} \frac{\psi^*(r,t)\psi^*(r',t)\psi(r',t)\psi(r,t)}{|\vec{r}-\vec{r}'|} \qquad (2)$$

$$+ \int d^3r\, \psi^*(r,t)\, U(r,t)\, \psi(r,t) \qquad (3)$$

$$+ \int d^3r \left(\frac{\varepsilon_0}{2} \dot{\vec{A}}^2(r,t) + \frac{1}{2\mu_0} \left(\vec{\nabla}\times\vec{A}(\vec{r},t)\right)^2 \right)$$

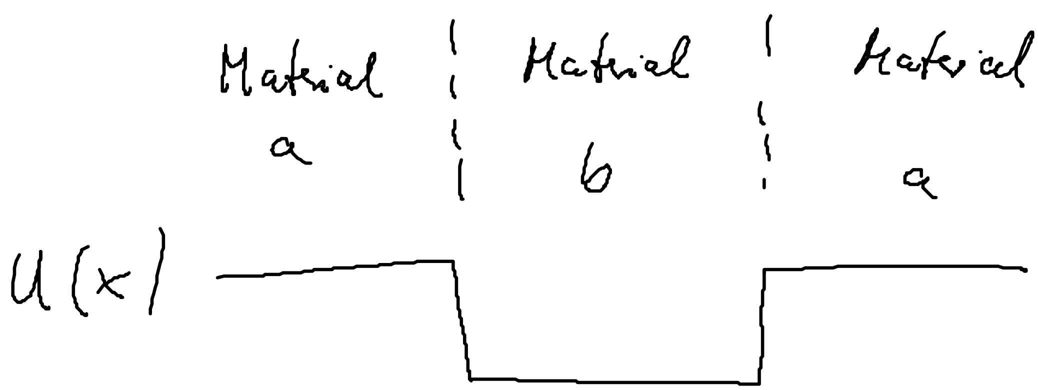
Der Hamiltonfunktion beschreibt das ww

Maxwell - Schrödinger feld (Elektron, Ionen)

① kinetische Energie des ψ-Felds im transversalen Anteil des elektromagnet. Felds

② potentielle Energie (Coulomb) des ψ-Felds durch WW der LT über das longitudinale em. Feld

③ Ankopplg. des ψ-Felds an extern Potential U



heute Strukturierung im Nanometerbereich

$\longrightarrow$ neue Eigenschaften des ψ-Felds

④ Energie des elektromagn. Felds

ψ-Feld ohne WW : $q \to 0$

(freies ψ und freies $\phi, \vec{A}$-Feld) später 2 ψ-Felder,

$$\psi_{el}, \; \psi_{ion} \;\hat{=}\; \psi_k$$

Übergang zu N-Feldern mit Index k:

$$\int d^3r \, \psi \rightarrow \sum_k \int d^3r \, \psi_k$$

$$\int d^3r \int d^3r' \rightarrow \sum_{kk'} \int d^3r \int d^3r' \, \psi_k(r) \, \psi_{k'}(r')$$

6. Feldtheorie für Festkörper

bisher beliebiges, geladenes ψ-Feld,
jetzt auf Festkörpereigenarten konzentrieren

6.1. Festkörperstruktur – Teilchen

Festkörper als Σ atomarer Systeme

- Atomkerne
- Elektronen
  - Rumpfelektronen (abgeschlossene Schalen)
  - Valenzelektronen (nicht abgeschlossene Schalen)

verantw. f. Bindung

Rumpfion „Ion"

„Elektronen"

Ψ_i

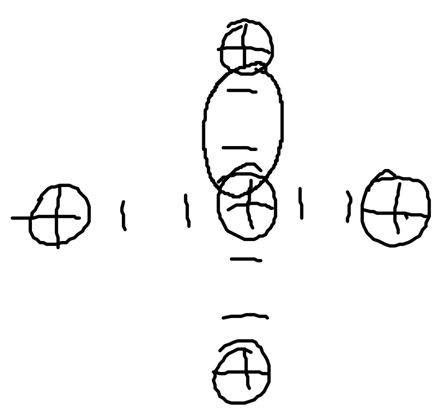
lokalisiert in Nähe von Gleichgewichtslagen und können Schwingg. um Ruhelage ausführen

Ψ_{el}

delokalisiert (Metall)
lokalisiert (Isolator)

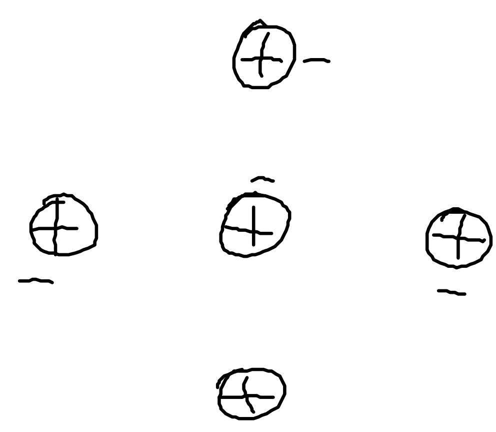
Bindungstypen bei Festkörpern

a) Anzahl nächster Nachbarn (4) = Anzahl der Valenzelektronen



paarweise Anordng. der El. mgl
„gerichtete Bindung"

b) Anzahl nächster Nachbarn > Anzahl der Valenzelektronen



Elektronen werden kollektiv genutzt (gemeinsam)
„Metallbindung"

6.2. Besonderheiten der QFT der Festkörper

(i) 2 Felder: Ionen, Elektronen

(ii) Ionen sind um Ruhelage lokalisiert

(iii) meist gewählter Zugang: halb klassisch
Coulomb-WW ($\psi^* \psi^* \psi \psi$) wird quantisiert
Vektorpotential wird klassisch behandelt

(iv) Coulomb-WW dominante WW

$$\Delta \phi = -\frac{\rho}{\varepsilon_0} \quad , \quad \Box \vec{A} = -\mu_0 \vec{j_T}$$

gemittelte Größe wichtig im Exp.

$$\left.\begin{aligned} \langle \rho \rangle_{\text{Mittelg.}} &\neq 0 \\ \langle j_i \rangle_{\text{Mittelg}} &= 0 \end{aligned}\right\} \text{ im Gleichgewicht}$$

Coulomb sollte der dominante
Beitrag sein, insbesondere f. kurze Abstände
(f. Magnetismus besser werden: $\vec{A}$ mitnehmen)

(V) Übergang zu Operatoren f. Quantisierung der Theorie:

$$\underbrace{x_i\,,\,p_j}_{\substack{\text{Teilchen}\\ \text{(konjugiert Variable)}}} \longrightarrow \underbrace{[\underline{x}_i\,,\,\underline{p}_j] = i\hbar\,\delta_{ij}}_{\text{Operatoren mit Vertauschungsrelation}}$$

$$\underbrace{\phi_{\alpha_1}\,,\,\Pi_{\alpha_2}}_{\substack{\text{Felder}\\ \text{(konjugiert Feldvariable)}}} \longrightarrow [\underline{\phi}_{\alpha_1}(\vec{r},t)\,,\,\underline{\Pi}_{\alpha_2}(\vec{r}\,',t)]_{\underline{\pm}} = i\hbar\,\delta(\vec{r}-\vec{r}\,')\,\delta_{\alpha_1\alpha_2}$$

Felder → Feldoperatoren

−/+ Quantisierg. für Bosonen / Fermionen (Elektronen)

$$[\underline{A},\underline{B}]_{\underline{\pm}} = \underline{A}\,\underline{B} \pm \underline{B}\,\underline{A}$$

(VI) Quantisierg. der Ionen

weil starke Lokalisierg. um Ruhelage

(also keine Quanteninterferenz der einzelnen

Wellenfunktionen)

$$\psi^*_{ion}(r,t)\,\psi_{ion}(r,t) \approx \sum_n \delta\left(\vec r - \vec R_n(t)\right)$$

n ↑ alle Ionen

$R_n(t)$: klassische Bahnkurve

wird später dann quantisiert

6.3. Verarbeitung der Punkte (i – vi) in der Hamiltonfunktion des Festkörpers

$$\vec A = 0, \quad u = 0, \quad k = el, ion$$

$$H = H_{ion} + H_{el} + H_{el-ion}$$

$$H_{ion} = \underbrace{\int d^3r\, \psi_i^* \frac{p^2}{2m_i} \psi_i}_{\text{kinet. Energie der Ionen}} + \underbrace{\frac{q_i^2}{2\cdot 4\pi\varepsilon_0} \int d^3r \int d^3r' \frac{\psi_i^*(r)\psi_i^*(r')\psi_i(r')\psi_i(r)}{(\vec r - \vec r')}}_{\text{Coulomb-WW der Ionen}}$$

$$H_{el} = \underbrace{\int d^3r\, \psi_{el}^* \frac{p^2}{2m} \psi_{el}} + \frac{e^2}{2\, 4\pi\varepsilon_0} \int d^3r \int d^3r' \frac{\psi_{el}^*(r)\psi_{el}^*(r')\psi_{el}(r')\psi_{el}(r)}{(\vec r - \vec r')}$$

kinetische Energie der Elektronen

Coulombwechselwirkung der Elektronen

$$H_{el-ion} = \frac{-e q_i}{4\pi\varepsilon_0} \int d^3r \int d^3r' \, \frac{\psi_{el}^*(r)\,\psi_i^*(r')\,\psi_i(r')\,\psi_{el}(r)}{|\vec{r} - \vec{r}\,'|}$$

keine Korrektur der Doppelt-zählung

Coulomb-WW von Elektronen und Ionen

$$\frac{1}{4\pi\varepsilon_0 |\vec{r} - \vec{r}\,'|} \longrightarrow W_{ion-el}(|\vec{r} - \vec{r}\,'|)$$

$$W_{ion-ion}(|\vec{r} - \vec{r}\,'|)$$

weil Rumpfelektronen die direkte Coulomb WW modifizieren