

Unterscheidung zw. Elektronen (Ψ) und Ionen ($R_n(t)$)

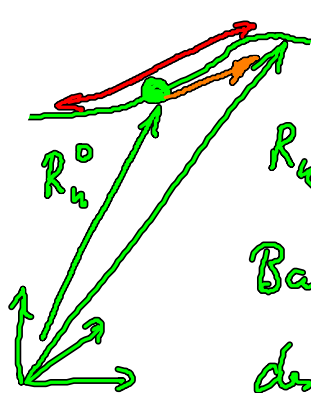
Lokalisierung des Ions in He-Ion, H-ion berücksichtigen

$$\text{Ionen dichte: } \Psi_i^*(r, t) \Psi_i(r, t) = \sum^n \delta(\vec{r} - \vec{R}_n(t))$$

δ -Fkt stellt sicher,
daß nur Ion an Stelle
der Bahnkurve $\vec{R}_n(t)$
gefunden wird

\nearrow
alle N -Ionen
 $\vec{R}_n(t) \hat{=}$ Bahnkurve
des n -ten Ions

später: Ausblg. $\vec{R}_n(t)$ um die Ionenruhelage quantisieren:



$u_n(t)$

$$R_n(t) = \vec{R}_n^0 + \vec{u}_n(t)$$

Bahnkurve als kleine Ausblg. $\vec{u}_n(t)$

des n -ten Ions um die Ruhelage \vec{R}_n^0

Konsequenz der Wechselwirkungen:

a) Elektron-Ion WW

Näherg. von oben

$$H_{e-ion} = \int d^3r \int d^3r' \frac{-q_i e \overbrace{\psi_i^*(\vec{r}') \psi_i(\vec{r}')} \psi_{el}^*(\vec{r}) \psi_{el}(\vec{r})}{|\vec{r} - \vec{r}'| 4\pi\epsilon_0}$$

$$= \int d^3r \sum_n \frac{-q_i e \psi_{el}^*(\vec{r}) \psi_{el}(\vec{r})}{|\vec{r} - \vec{R}_n| 4\pi\epsilon_0}$$

$$= \int d^3r \sum_n W_{e-ion}(\vec{r} - \vec{R}_n) \psi_{el}^*(\vec{r}) \psi_{el}(\vec{r})$$

Das ist die effektive WW des Ions mit der elektronischen Ladung.

nutze die Lokalisierung um Ruhelage

$$\vec{R}_n(t) = \vec{R}_n^0 + \vec{u}_n(t)$$

klein! \rightarrow Taylorreihe

$$H_{e-ion} = \int d^3r \sum_n W_{e-ion}(\vec{r} - \vec{R}_n^0) \psi_{el}^*(\vec{r}) \psi_{el}(\vec{r})$$

$$+ \int d^3 r \sum_n \vec{a}_n \cdot \vec{\nabla}_{R_n} W_{el-ion}(\vec{r} - \vec{R}_n) \Big|_{R_n^0} \varphi_{el}^*(r) \varphi_{el}(r)$$

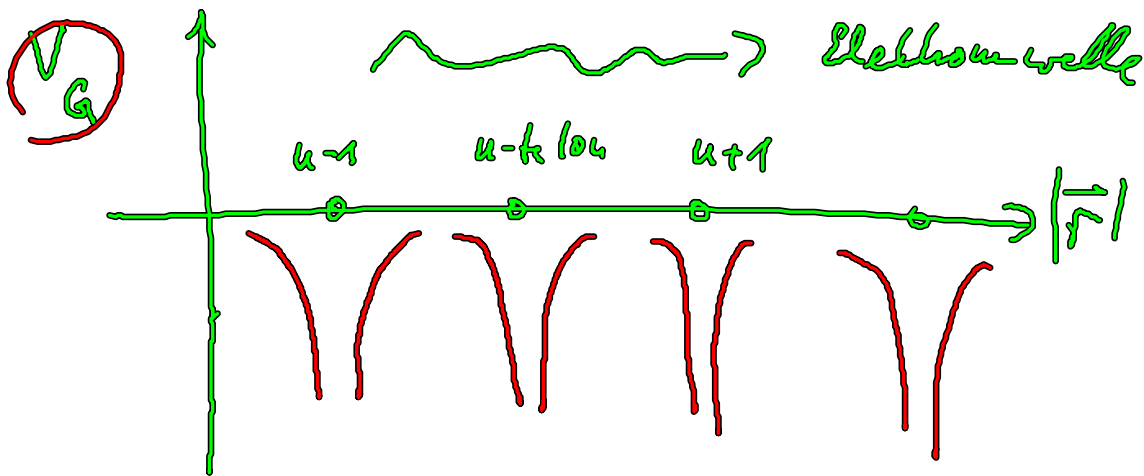
↑ in alle 3 Richt. Taylor 1. Ordng.

$$H_{el-ion} = H_{el-ion}^{fitter} + H_{el-ph}$$

- Der erste Term beschreibt die bewegl. Elektronen im Feld der ruhenden Ionen (R_n^0 (~~\neq~~))

$$H_{el-ion}^{fitter} = \int d^3 r V_G(\vec{r}) \varphi_{el}^*(r) \varphi_{el}(r)$$

$$V_G = \sum_n W_{el-ion}(\vec{r} - \vec{R}_n^0)$$



Das Problem der Bewegung der Elektronen in ruhenden Ionen führt auf das sogenannte Bandstrukturproblem (später)

- Das zweite Term H_{2-ph} beschreibt die WW der El-Welle mit dem zeitabhängigen Potential der Auslenkungen $\vec{u}_n(t)$, man bezeichnet die kollektive Anregungen aller $\vec{u}_n(t)$ als Phononen.

- Das Verfahren, Ionenbeweg. störungstheoretisch aufgrund der schweren Masse zu berücksichtigen heißt Born-Oppenheimer.

(b) Ion-Ion-Wechselwirkung

$$H_{ion} = \frac{1}{2} \int d\vec{r} \int d\vec{r}' \frac{q_i^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{\psi_i^*(\vec{r}) \psi_i^*(\vec{r}') \psi_i(\vec{r}') \psi_i(\vec{r})}{|\vec{r} - \vec{r}'|}$$

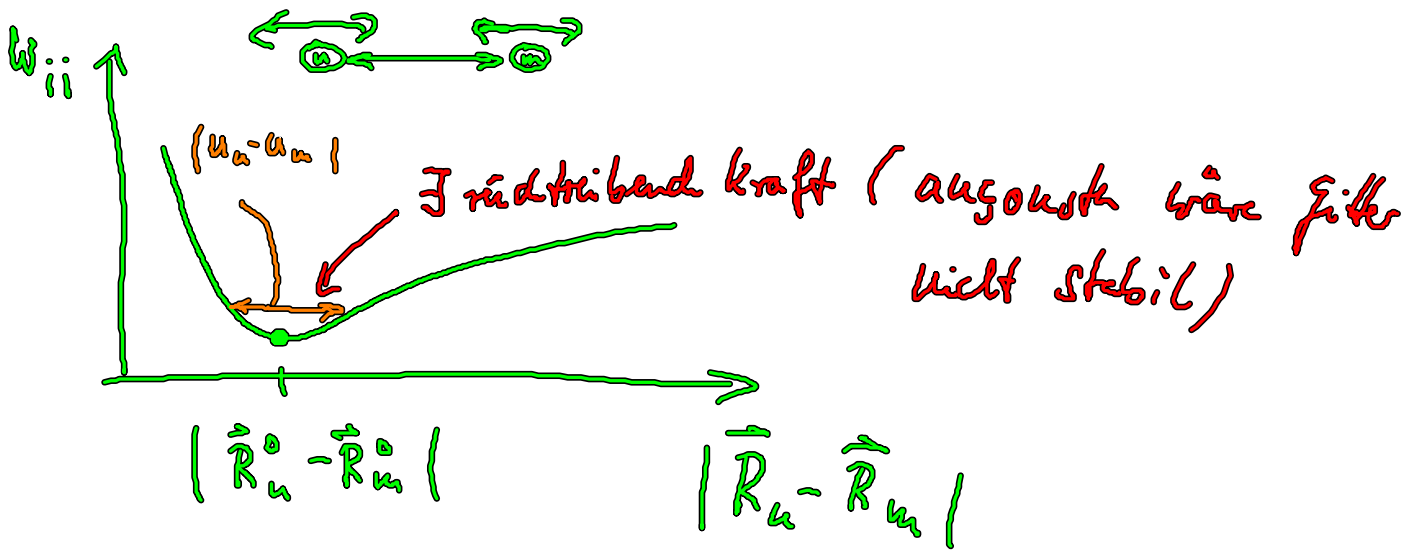
Näher. einsetze

$$= \frac{1}{2} \sum_{i,j} W_{ion-ion} (\vec{R}_i - \vec{R}_j)$$

Um ein stabiles Kristall (FK) zu haben muß $W_{i-i}(|\vec{R}_i - \vec{R}_i|)$ ein stabiles Minimum

als Funktion des Abstands zweier

loose R_u, R_m haben:



$$\frac{1}{2} \sum_{u, m} W_{i-i} (\vec{R}_u - \vec{R}_m) \approx \left(\text{2. Ordnung in Taylor} \right)$$

$$= \frac{1}{2} \sum_{u, m} W_{i-i} (\vec{R}_u^0 - \vec{R}_m^0) \quad \left(\text{Coulomb / Wechselwirkung} \right)$$

Zwisch den ruhenden
loose partnern

$$+ \frac{1}{2} \sum_{u, m} (\vec{u}_u - \vec{u}_m) \cdot \vec{\nabla}_{R_u - R_m} W_{i-i} (R_u - R_m) \Big|_{R_u^0 - R_m^0}$$

verschwindet aufgrund der Stabilität des (loose partnern)

$$+ \frac{1}{2} \sum_{u, m} \sum_{\alpha, \beta} \frac{1}{2} (u_u^\alpha - u_m^\alpha) (u_u^\beta - u_m^\beta) \frac{\partial^2 W_i(R_u, R_m)}{\partial R_u^\alpha \partial R_m^\beta}$$

kartesische
Koordinaten
 $\alpha, \beta \hat{=} x, y, z$

$\frac{\partial^2 W_i(R_u, R_m)}{\partial R_u^\alpha \partial R_m^\beta}$

$$\phi_{\alpha\beta}^{um} = \left(\delta_{um} \sum_{u'} W_{\alpha\beta}^{uu'} - \underline{\underline{W_{\alpha\beta}^{um}}} \right)$$

$$H_{i-i} = \frac{1}{2} \sum_{\substack{u, m \\ \alpha, \beta}} \phi_{\alpha\beta}^{um} u_u^\alpha u_m^\beta + \sum_{u, m} \frac{1}{2} W_{i-i}(R_u^0 - R_m^0)$$

H_{i-i} kann als quadratische Form der Auslenkungen der Ionen geschrieben werden, und stellt damit den Beitrag der potentiellen Energie gekoppelter Oszillatoren dar, $\phi_{\alpha\beta}^{um}$ sind eine Art Kraftkonstanten.

Da quadratische Formen diagonalisiert werden können, kann H_{i-i} als Summe über

kollektive, ungeschaltete Oszillatoren umge-
schrieben werden ("Phononen").

6.3. Zusammenfassung der Hamiltonfunktion

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

$$H_{el} = \int d^3r \psi^*(r,t) \left(\underbrace{\frac{(p + e\vec{A})^2}{2m}}_{\text{kinetische E. des Elektrons}} + \underbrace{U(r,t)}_{\text{externes Potential}} + \underbrace{V_G(r)}_{\text{Ionenpotential}} \right) \psi(r,t)$$

$$+ \frac{1}{2} \int d^3r \int d^3r' \frac{e^2 \psi^*(r,t) \psi^*(r',t) \psi(r',t) \psi(r,t)}{4\pi\epsilon_0 |\vec{r} - \vec{r}'|}$$

Coulomb-WW der Elektronen untereinander

Felder $\vec{A} = \vec{A}_{\text{intern}} + \vec{A}_{\text{extern}}$, $U = U_{\text{extern}}$, V_G bekannt

$\vec{A}_{\text{int}} = -\mu_0 \vec{j}_r$

Quantenoptik

z.B. \vec{E}, \vec{B} -Feld von außen
oder Streutheorie.

$$\vec{E}_{\text{ext}} = -\partial_t \vec{A}_{\text{ext}} - \vec{\nabla} U_{\text{ext}}$$

$$\vec{B}_{\text{ext}} = \vec{\nabla} \times \vec{A}_{\text{ext}}$$

$$H_{\text{ion}} = \sum_n \frac{p_n^2}{2m_n} + \sum_{u, \mu} \frac{1}{2} \phi_{u\mu}^{\alpha\beta} u_n^\alpha u_n^\beta + \sum_{u, \mu} \frac{1}{2} W_{ii} (R_u^0 - R_u^0)$$

↑
klassisch, später quantisieren.

WW des externen Feldes nur mit Elektronen,
Ankoppplg. an Ionen erfolgt analog

$$H_{\text{el-ph}} = \int d^3r \sum_u \vec{u}_u \cdot \vec{\nabla}_{R_u} W_{\text{el-ion}}(\vec{r} - \vec{R}_u | \psi(\vec{r}) \psi(\vec{r}))$$

Koppplg. von El. an bewegl. Ionen ($\psi_{\text{el}} \rightarrow \psi$)

II Quantisierung des Elektronenfelds

1. Feldoperatoren

$$\text{Übergang von } \psi, \bar{\psi} \rightarrow \underline{\psi}, \underline{\bar{\psi}} = \underline{\psi}^\dagger i\gamma_4$$

↑
↑
 $i\frac{\hbar}{2} \psi^*$

$\varphi(\vec{r}, t), \varphi^\dagger(\vec{r}, t)$ werden als Kommutator, Energieerhaltung
Zeitwert

erzeugt/vernichtet ein Elektron an Ort \vec{r} zur Zeit t

(Interpretation genau später)

ϕ_α \rightarrow $\varphi_{-s}, \varphi_{-s}^\dagger$ (4 Felder mit $s = \uparrow \downarrow$)

s als Spin Freiheitsgrad

Vertauschungsrelationen fordern:

$$[\varphi_{-s}(\vec{r}, t), \varphi_{-s'}^\dagger(\vec{r}', t)]_+ = \delta(\vec{r} - \vec{r}') \delta_{ss'}$$

$$[\varphi_{-s}^{(+)}(\vec{r}, t), \varphi_{-s'}^{(+)}(\vec{r}', t)]_+ = 0$$

$$+ \hat{=} [A, B]_{\pm} = AB \pm BA$$

+ Fermionfeld (Elektron!)

- Bosonfeld (Photon!)

Die Plusquantisierung stellt den Fermi charakter sicher:

$$\psi_{-s}^{\dagger}(r,t) \psi_{-s}^{\dagger}(r,t) + \psi_{-s}^{\dagger}(r,t) \psi_{-s}^{\dagger}(r,t) = 0$$

$$\psi_{-s}^{\dagger} \psi_{-s}^{\dagger} = - \psi_{-s}^{\dagger} \psi_{-s}^{\dagger} \rightarrow \psi_{-s}^{\dagger} \psi_{-s}^{\dagger} = 0$$

Man kann keine identischen Fermionen an selb. Ort erzeugen.

Bewegungsgl. f. Operatoren ist Heisenberg-Bewegungsgl

$$\partial_t \psi_{-s}(r,t) = \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \psi_{-s}(r,t)]$$

daraus kann man Observable wie Ladungsdichte

$$\rho = e \psi_{-s}^{\dagger} \psi_{-s}$$

Zusammenfassung der Quantisierung

a) konjugierte Variable paar der klass. Theorie

$$\underline{\psi, \psi^{\dagger}} \sim \pi_{\psi}$$

b) $\psi \rightarrow \underline{\psi}, \quad \psi^{\dagger} \rightarrow \psi^{\dagger}$

c) Vertauschungsrelation (\pm) fordern

d) über Heisenberggl. kann $\underline{F}(r, t)$ berechnet werden

e) beobachtbare Größe berechnen

$$g = e \underline{F}^{\dagger} \underline{F}, \text{ Mittelwert } \langle \rangle_{t_0}$$

f) noch nötig: Zustandsraum kennen
(durch $[,]$ bestimmen)