

2) Feldmoden

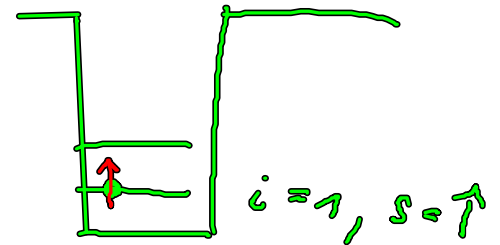
$\underline{\psi}_s, \underline{\psi}_s^\dagger$ sind nicht immer die günstigsten Operatoren
um konkrete Probleme anzugehen

man entwickelt $\underline{\psi}, \underline{\psi}^\dagger$ nach Feldmoden $\{\psi_{is}\}$

(günstig gewählte vollständiges System im Ortsraum)

$$H_0 \psi_{is}(\vec{r}) = \epsilon_{is} \psi_{is}(\vec{r})$$

Orbitalquantenzahl \nearrow Spinquantenzahl \nwarrow



$$\underline{\psi}_s(\vec{r}, t) = \sum_i \underline{a}_{is}(t) \psi_{is}(\vec{r})$$

↑ $\underline{a}_{is}(t)$ trägt Operatorcharakter
($\underline{\psi}_{is}$ wird weglassen)

H_0 als Sinuswelle Well

$$H_0 = \frac{\underline{p}^2}{2m} \left(+ V_G(\vec{r}) \right) \rightarrow \psi_{is}(\vec{r})$$

↓

$$\psi_{is} = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} |s\rangle$$

$$\epsilon_{is} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$$

aus ψ folge die Vertauschungsrelationen

für $a_{is}^{(+)}$ (Erzeuger + Vernichter einer Elektron in Mode i, s)

$$\underline{\text{UA:}} \quad [a_{is}, a_{js'}^{\dagger}] = \delta_{ss'} \delta_{ij}$$

$$[a_{is}^{(+)}, a_{js'}^{(+)}] = 0$$

+ ebenso gilt die Heisenberggleichung für a 's

Ziel: \underline{H} in zweiter Quantisierung mit a 's anzugeben

$$\underline{H}_0 = \sum_s \int d^3r \psi_s^{\dagger}(r,t) \overset{\uparrow}{H_0} \psi_s(r,t)$$

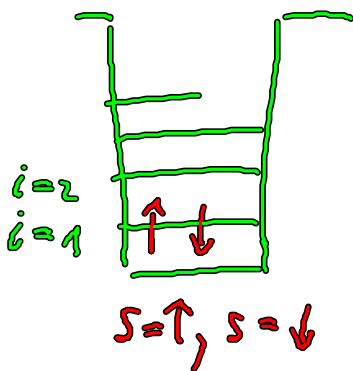
z.B. kinetisch + Filterpotential
 H_0 ist ein 1-Teilchenoperator

$$\underline{H}_0 = \sum_s \sum_{ij} \int d^3r \underbrace{\psi_{js}^*(\vec{r})}_{\delta_{ij}} a_{js}^\dagger(t) \underbrace{H_0 \psi_{is}(\vec{r})}_{\epsilon_{is} \psi_{is}(\vec{r})} a_{is}(t)$$

$$\underline{H}_0 = \sum_{si} \epsilon_{is} a_{is}^\dagger a_{is}$$

Das ~~ist es~~ ^{sind viele} gm. Oszillator in Leiteroperator bzw. in Erzeugen / Vernichten, automatische Vielteilchentheorie. Es gelten fermionische Vertauschungsregeln

Interpretation: am Bsp. Teilchen in Kiste

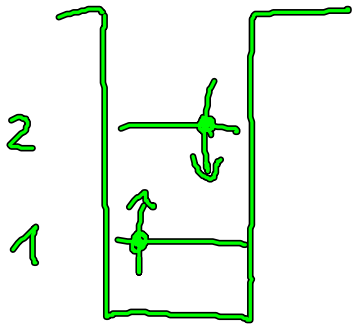


Eigenwertproblem: $\underline{H}_0 |\varphi\rangle = E |\varphi\rangle$

$$E = \sum_{i,s} \epsilon_{is} n_{is}, \quad |\varphi\rangle = \prod_{(i,s)} |n_{is}\rangle$$

$$n_{is} = 0, 1$$

$$a_{is}^\dagger a_{is} |n_{is}\rangle = n_{is} |n_{is}\rangle, \quad |n_{is}\rangle = \left(a_{is}^\dagger \right)^{n_{is}} |0\rangle$$



$$|\varphi\rangle = a_{1\uparrow}^\dagger a_{2\downarrow}^\dagger |0\rangle^1 |0\rangle^2$$

$$E = n_{1\uparrow} \epsilon_{1\uparrow} + n_{2\downarrow} \epsilon_{2\downarrow}$$

$$= \epsilon_1 + \epsilon_2$$

allg. Zustand:

$$|\varphi\rangle = \left| \begin{array}{cccc} 1\uparrow & 1\downarrow & 2\uparrow & 2\downarrow & \dots \\ 1 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \end{array} \right\rangle$$

3. Das Jellium-Modell des Elektronengases

3.1. Modellvorstellung

Berechnung der Ionenladung (+)



die wertige Metalle (Alkali)
 jedes Atom gibt 1 Außerelektron ab
 f. gemeinsamen Bindung.

N_- Elektron im Volumen V

Ladungsneutralität $N_- = N_+ = N$
 El-Zahl \uparrow Ionenzahl \uparrow

keine Ion-Bewegg. \rightarrow Hal-Pl = 0, Ion-Ion klassisch

Hamiltonoperator des Jellium-Modells:

$$\underline{H} = \underline{H}_{el} + \underline{H}_{ion-ion} + \cancel{\underline{H}_{el-pl}}$$

$$\underline{H}_{ion-ion} = \frac{e^2}{2} \sum_{n,m} \frac{1}{\text{f.F.E. } |\vec{R}_n - \vec{R}_m|}$$



$$\sum_n = \sum_n \frac{\Delta V_n}{\Delta V_n} \rightarrow \int dV \frac{\Delta N}{\Delta V} = \int dV \frac{N}{V}$$

n Teilchen dichte
des Ionen

$$H_{ion-ion} = \frac{e^2}{2} \int dV' \int dV \frac{n^2}{4\pi\epsilon_0 |\vec{R} - \vec{R}'|}$$

\uparrow \uparrow
 u. Summe u. Summe

$$dV = d^3R, \quad dV' = d^3R'$$

Das Integral geht ∞ , daher Konvergenz erzwungen

Faktor $e^{-\alpha |\vec{R} - \vec{R}'|}$; um Ion-Ion Potential

An Ende $\alpha \rightarrow 0$. ab zuschneiden.

$$= \frac{e^2}{2} \underbrace{\frac{N^2}{V^2}}_{n^2} \underbrace{\int dV'}_V \underbrace{\int dV \frac{e^{-\alpha r}}{4\pi\epsilon_0 r}}_{\text{Kugelkoordin.}} = \frac{e^2 N^2}{2\epsilon_0 V \alpha^2}$$

$\vec{R} \rightarrow \vec{R} - \vec{R}' = \vec{r}$

$$H_{el} = \sum_s \int d^3r \psi_s^\dagger \left(\frac{p^2}{2m} \right) \psi_s + H_{el-el} +$$

① kinetische Energie H_0 ②

$$+ \sum_s \int d^3r \psi_s^\dagger V_G(\vec{r}) \psi_s(\vec{r})$$

③

$$\psi_{is} = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} |s\rangle, \quad \psi \rightarrow a_{ks}$$

$$\textcircled{1} H_1 = \sum_{s,k} \frac{\hbar^2 k^2}{2m} a_{ks}^\dagger a_{ks}$$

Interpretation: Energie aus allen Spins und Wellenzuständen mal Besetzungszahl

$$\textcircled{2} H_2 = \frac{e^2}{8\pi\epsilon_0} \sum_{\substack{s_1 s_2 s_3 s_4 \\ k_1 k_2 k_3 k_4}} \int d\vec{r} \int d\vec{r}' \frac{e^{-i\vec{k}_1\vec{r}} e^{-i\vec{k}_2\vec{r}'} e^{i\vec{k}_3\vec{r}'} e^{i\vec{k}_4\vec{r}}}{|\vec{r}-\vec{r}'| V^2} \\ \langle s_1 | \langle s_2 | \langle s_3 | \langle s_4 | a_{k_1 s_1}^\dagger a_{k_2 s_2}^\dagger a_{k_3 s_3} a_{k_4 s_4}$$

$3 \leftrightarrow 4$ (ÜA)

$$= \frac{1}{2} \sum_{\{k_i s_i\}} \frac{e^2}{V\epsilon_0} \delta_{s_1 s_3} \delta_{s_2 s_4} \delta_{k_1+k_2, k_3+k_4} \frac{1}{|\vec{k}_1-\vec{k}_3|^2 + \alpha^2}$$

beschreibt impuls erhaltende, spin erhaltende Stöße

über Coulomb-WW $\sim \frac{1}{|\vec{k}_1-\vec{k}_3|^2 + \alpha^2}$

$$\textcircled{3} \quad H_3 = \underbrace{\ominus}_{-} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \int d^3r \int \underset{\text{lok.}}{d^3R} \frac{e^{-\alpha|\vec{r}-\vec{R}|}}{|\vec{r}-\vec{R}|} \frac{N^2}{V^2} = -\frac{e^2 N^2}{\epsilon_0 V \alpha^2}$$

El-feld - WW

$$\underline{H} = \sum_{s,k} \underbrace{\frac{\hbar^2 k^2}{2m}}_{\epsilon_k} a_{k,s}^\dagger a_{k,s} + \frac{1}{2} \sum_{\{k,s\}} V_{s_1 s_2 s_3 s_4}^{k_1 k_2 k_3 k_4} a_{k_1 s_1}^\dagger a_{k_2 s_2}^\dagger a_{k_3 s_3} a_{k_4 s_4}$$

kurze Definition
(UA)

$$- \frac{1}{2} \frac{e^2 N^2}{V \alpha^2}$$

Ziel: letzter Term fällt mit 1 Term aus Coulomb WW weg.

$$\underline{H}_{el-el} = \left| \begin{array}{ll} k_1 = k+q & k_3 = k \\ k_2 = p-q & k_4 = k_1 + k_2 - k_3 = p \end{array} \right|$$

$k_i \rightarrow p, q, k$ (1 way wegen Kronecker)

(4)

$$= \frac{1}{2} \sum_{s_1 s_2} \sum_{q, p, k} \frac{e^2}{V(q^2 + \alpha^2) \epsilon_0} a_{k+q, s_1}^+ a_{p-q, s_2}^+ a_{p, s_2} a_{k, s_1}$$

Der Term mit $q=0$ fällt weg mit $-\frac{1}{2} \frac{e^2 N^2}{V \alpha^2 \epsilon_0}$

$$H_{d-d}(q=0) = \frac{1}{2} \sum_{s_1 s_2} \sum_{p, k} \frac{e^2}{V \alpha^2 \epsilon_0} a_{k, s_1}^+ a_{p, s_2}^+ a_{p, s_2} a_{k, s_1}$$

$$= -\frac{1}{2} \sum_{s_2 p} \sum_{s_1 k} \frac{e^2}{V \alpha^2 \epsilon_0} a_{k, s_1}^+ (\delta_{pk} \delta_{s_1 s_2} - a_{k, s_1}^+ a_{p, s_2}) a_{p, s_2}$$

Klammerschluss

$$= -\frac{1}{2} \frac{e^2}{V \alpha^2 \epsilon_0} \sum_{k, s_1} a_{k, s_1}^+ a_{k, s_1} \rightarrow \text{verschwindet im thermodynamischen Limes}$$

$$+ \frac{1}{2} \frac{e^2}{V \alpha^2 \epsilon_0} \left(\sum_{k, s_1} a_{k, s_1}^+ a_{k, s_1} \right) \left(\sum_{s_2 p} a_{p, s_2}^+ a_{p, s_2} \right)$$

Später: $\underbrace{\quad}_{= N} \quad \underbrace{\quad}_{= N}$ oder klass. Näherung

$$= \frac{1}{2} \frac{e^2}{V \alpha^2 \epsilon_0} N^2 \quad (\text{was wir zeigen wollten})$$

der erste Term wird 0 im td. Limes:

$$= -\frac{1}{2} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{N}{V} = -\frac{N}{V} \int d\vec{r} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 |\vec{r}|} \quad (\alpha \rightarrow 0)$$

$$= -\frac{N}{V 4\pi\epsilon_0} \int_{-L}^{+L} dx \int_{-L}^{+L} dy \int_{-L}^{+L} dz \frac{e^2}{|\vec{r}|}$$

$$\sim \frac{N}{V} \int_{-L}^{+L} d\bar{x} \int_{-L}^{+L} d\bar{y} \int_{-L}^{+L} d\bar{z} \frac{1}{r} L^2, \quad V=L^3$$

$$\underbrace{\bar{x} = \frac{x}{L}}$$

L, N kommt nicht vor

$$\sim \frac{N}{L} \quad , \quad \frac{H'}{N} \rightarrow \frac{1}{L} \quad \begin{array}{l} \text{Energie pro Teilchen} \\ = \text{konstant} \end{array}$$

Je größer die Probe ($L \rightarrow \infty$) desto weniger wichtig.

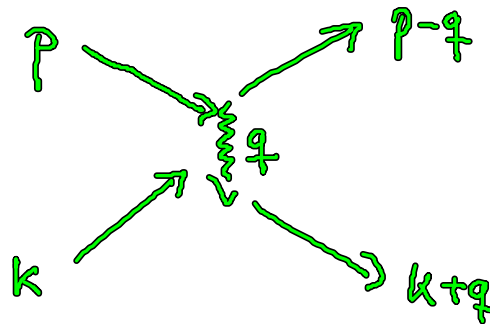
Damit stellt die Hamiltonian des Elektronengases fest

a) $\underline{H} = \sum_{k,s} \epsilon_k a_{ks}^\dagger a_{ks}$ kinetische Energie

\sum_{Zustand} Energie (Zustand) Teilchenzahl (Zustand)

$+ \frac{1}{2} \sum_{s_1, s_2} V_q a_{k+q, s_1}^\dagger a_{p-q, s_2}^\dagger a_{p, s_2} a_{k, s_1}$

k, q, p
($q \neq 0$)



2 Teilchen laufen ein,
2 Teilchen laufen aus

b) die Coulomb Stöße sind impuls erhaltend
die Wahrscheinlichkeit wird proportional

zu V_q sein $V_q = \frac{e^2}{\epsilon_0 V q^2} \sim \frac{1}{q^2}$

je höher q desto weniger Wahrscheinlich

(q - relative Impulsübertrag)