

V.3 Quantisierung des Materiefelds

Ziel: Wieder Elektron als ein Quant zu sehen
erzeugen und vernichten.

Auch WW mit Teilchen erzeugen und
-vernichtung darstellen.

Startpunkt Lagrange für das klassische Wellenfeld!

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

ψ, ψ^x sind voneinander unabhängig (Alternatives Regel und Imaginärteil).

Bildung der Lagrangegl.:

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

\Leftarrow Schrödingergl.!

Der kanonische Impuls ist

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

Die Hamiltonfunktion, kann mit der Hilfe einer Legendetransformation hergeleitet werden.

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

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

Wichtig Unterschiede Hamiltonfunktion und Hamiltonoperatoren

Wir können nachher die Wellenfunktion oder EV $\psi_n(t)$ des Hamiltonoperators entwickeln

$$\psi(x) = \sum_{\nu} a_{\nu} \psi_{\nu}(x) \quad \text{mit } a_{\nu}(t) = e^{-\frac{i}{\hbar} E_{\nu} t}$$

$$\psi^*(x) = \sum_{\nu} a_{\nu}^* \psi_{\nu}^*(x) \quad a_{\nu}, a_{\nu}^* \text{ sind Entwicklungskoeffizienten!}$$

Wir postulieren jetzt Vertauschungsrelationen:

Bosonen

$$[\pi^*(x), \psi^+(x')]_{-} = \frac{\hbar}{i} \delta(x-x') \quad \text{sowie } [\psi(x), \psi(x')]_{-} = 0$$

\Downarrow

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

und

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

Sind Heisenbergoperatoren

$$\psi(x) = \sum_{\nu} a_{\nu} \psi_{\nu}(x) \quad | \cdot \psi_{\nu'}^*(x) | \int dx$$

$$\int dx \psi_{\nu'}^*(x) \psi(x) = \sum_{\nu} a_{\nu} \underbrace{\int dx \psi_{\nu'}^*(x) \psi_{\nu}(x)}_{\delta_{\nu\nu'}} = a_{\nu'}$$

$$\Rightarrow a_{\nu'} = \int dx \psi_{\nu'}^*(x) \psi(x)$$

analog $a_{\nu'}^{\dagger} = \int dx \psi_{\nu'}(x) \psi^{\dagger}(x)$

Damit Kommutator lesbar

$$[a_{\nu}, a_{\nu'}^{\dagger}]_{-} = \int dx \int dx' \psi_{\nu}(x) \psi_{\nu'}^{\dagger}(x') \underbrace{[\psi(x), \psi^{\dagger}(x')]}_{\delta(x-x')} \\ = \int dx \psi_{\nu}(x) \psi_{\nu}^{\dagger}(x) = \delta_{\nu\nu'}$$

$$\Rightarrow [a_{\nu}, a_{\nu'}^{\dagger}]_{-} = \delta_{\nu\nu'} \quad \text{analog} \quad [a_{\nu}, a_{\nu'}]_{-} = [a_{\nu}^{\dagger}, a_{\nu'}^{\dagger}]_{-} = 0$$

Grund: Im Prinzip sind $\psi(x), \psi^{\dagger}(x)$ Erzeuger und Vernichter der Ortsbasis und $a_{\nu}, a_{\nu}^{\dagger}$ der Energieeigenbasis.

Bei Basiswechseln bleiben Kommutatorrelationen invariant.

Problem bei Elektronen

$a_{\nu}^{\dagger} a_{\nu}^{\dagger} |\phi_0\rangle \neq 0$, man kann beliebig Teilchen erzeugen!

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

Für Elektronen sollte

$$a_{\nu}^{\dagger} a_{\nu}^{\dagger} |\phi_0\rangle = 0 \quad (\text{eigentlich für jeden Zustand})$$

$$\text{bel. Zustand } |\phi\rangle: a_{\nu}^{\dagger} a_{\nu}^{\dagger} |\phi\rangle = 0 \Rightarrow a_{\nu}^{\dagger} a_{\nu}^{\dagger} = 0$$

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

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

$$\text{weil } a_{\nu}^{\dagger} a_{\nu}^{\dagger} = -a_{\nu}^{\dagger} a_{\nu}^{\dagger} \Rightarrow 2 a_{\nu}^{\dagger} a_{\nu}^{\dagger} = 0$$

Also bei Fermionen gelten + Kommutatoren bei Quantisierung des Schrödingerischen Wellenfelds!

Weiter mit dem Transporter gilt das auch: (Für Fermionen!)

$$\left\| \begin{aligned} [\varphi(\underline{k}), \varphi^\dagger(\underline{k}')]]_+ &= \delta(\underline{k} - \underline{k}') \\ [\varphi(\underline{k}), \varphi(\underline{k}')]]_+ &= [\varphi^\dagger(\underline{k}), \varphi^\dagger(\underline{k}')]]_+ = 0 \end{aligned} \right\|$$

Formierung des Hamiltonoperators

$$H = \int \varphi^\dagger(\underline{k}) \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(\underline{k}) \right\} \varphi(\underline{k}) d^3k = \sum_{\nu} E_{\nu} a_{\nu}^{\dagger} a_{\nu}$$

$$\parallel \sum_{\nu} \varphi_{\nu}(\underline{k}) a_{\nu}$$

Postulat Vakuumzustand:

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

Bosonen

Fock Zustände

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

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

Fermionen

Fock Zustand

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

$$n_{\nu} = 0, 1$$

VII. Elektron - Elektron - Wechselwirkung

VII.1 Jellium Modell

Einfaches Modell für Alkalimetalle:

Zellium (Jelly ist Normdarstellung)

Ide: Ionen bilden positivem Hintergrund
für Elektronen.

(Dabei seeignet für schwach gebundenen Elektronen)

Startpunkt: Klassische Hamiltonop. der Coulomb Wechselwirkung

$$H_C = \frac{1}{2} \sum_{\alpha, \alpha'} \int d\underline{r} \int d\underline{r}' \underbrace{\rho_{\alpha}(\underline{r})}_{\text{Ladungsdichte}} \rho_{\alpha'}(\underline{r}') \frac{e^2}{4\pi \epsilon_0 |\underline{r} - \underline{r}'|}$$

α kann Ion oder Elektron sein!

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

und konstanten Hintergrund.

$$\rho_i(\underline{r}) = (+e) \frac{N}{V} \quad (N \text{ Anzahl der Ladungen})$$

Wir führen ein Formelfunktions durch:

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

mit $\rho_{e, q} = -\frac{e}{V} \sum_{i=1}^N e^{-iq \cdot \underline{r}_i}$

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

Wir teilen jetzt die Beiträge auf:

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

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

$$= \frac{e^2}{2} \left(\sum_{i,j,q \neq 0} W_q e^{iq \cdot (r_i - r_j)} + \underbrace{W_{q=0} N^2}_{\substack{\text{Anzahl der Elektronen} \\ \text{Durchschnittsbetrag der Elektronen-} \\ \text{Elektronenwechseln bei gleichm. Verteilung der Elektronen}}} \right)$$

$$H_c^{e-i} = -\frac{e^2}{2} \sum_{i,j,q} W_q \underbrace{N \delta_{q,0}}_{\substack{\text{Elektronenwechseln bei gleichm.} \\ \text{Verteilung der Elektronen}}} \left(\underbrace{e^{iq \cdot r_i}}_{\rho_{e,-q}} + \underbrace{e^{-iq \cdot r_j}}_{\rho_{e,q}} \right) = -e^2 W_{q=0} N^2$$

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

Wir addieren jetzt alle Beiträge auf

$$\| H_c = \frac{e^2}{2} \sum_{i,j \neq i, q \neq 0} W_q e^{iq \cdot (r_i - r_j)} \| \quad \text{⊗} \leftarrow \text{Corollary from } G_p \text{ in Jellium Model}$$

\uparrow $q=0$ fehlt wegen konstanten Lennardpotential weg!

$$\sum_{\substack{i,j \neq i \\ q \neq 0}} W_q e^{iq(r_i - r_j)} = \sum_{i,q \neq 0} W_q e^{iq \cdot r_i} \sum_{j \neq i} e^{-iq \cdot r_j} = \sum_{i,q \neq 0} W_q e^{iq \cdot r_i} \left(\sum_j e^{-iq \cdot r_j} - e^{-iq \cdot r_i} \right)$$

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

$$\Rightarrow \| H_c = \frac{1}{2} \sum_{q \neq 0} W_q (V^2 \rho_{e,-q} \rho_{e,q} - e^2 N) \|$$

$\underbrace{-e^{-iq \cdot r_i}}_{\substack{\text{Subst.} \\ \text{WW} \\ \text{abziehen}}}$

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

$$P_{e,-q} \rightarrow \hat{P}_{e,-q} \quad N \rightarrow \hat{N} \leftarrow \text{Elektronenzahloperator}$$

$$H_C = \frac{1}{2} \sum_{q \neq 0} V_q (V^2_{\hat{P}_{e,-q}} \hat{P}_{e,q} - e^2 \hat{N})$$

$\hat{P}_{e,-q}$:

$$\hat{P}_e(\underline{k}) = -e \hat{n}(\underline{k}) = -e \sum_s \psi_s^\dagger(\underline{k}) \psi_s(\underline{k})$$

Ortsabhängige Ladungsdichte $\hat{n}(\underline{k})$ Teilchenzahldichte $\hat{=}$ Produkt der Wellenfunktion $\psi_s^\dagger(\underline{k}) \psi_s(\underline{k})$ durch Hamiltonoperator ersetzen.

$$\hat{P}_{e,-q} = \int d\underline{x} e^{i\underline{q} \cdot \underline{x}} \hat{P}_e(\underline{k}) = -e \int d\underline{x} e^{i\underline{q} \cdot \underline{x}} \sum_s \psi_s^\dagger(\underline{k}) \psi_s(\underline{k})$$

Weiterhin ist

$$\hat{N} = \int d\underline{x} \hat{n}(\underline{k}) = \int d\underline{x} \sum_s \psi_s^\dagger(\underline{k}) \psi_s(\underline{k})$$

Wir nehmen jetzt zwei Elektronen an: (ohne Wellen)

Dann ist:

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

$$\hat{P}_{e,-q} = -e \sum_{\underline{k}, \underline{k}', s} \frac{1}{V} \int d\underline{x} e^{i\underline{q} \cdot \underline{x}} a_{\underline{k}',s}^\dagger a_{\underline{k},s} e^{i(\underline{k}-\underline{k}') \cdot \underline{x}}$$

$\delta_{\underline{k}-\underline{k}',-q}$

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

Einsetzen in H_C

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

$$V_f = e^2 W_f$$

Vergleich $V_f = \frac{e^2}{\epsilon_0 V} \frac{1}{q^2}$

Für V Ham.-Op.
in Normalordnung.