

2.6. Feldoperatoren und Zustände

kurze Zusammenfassung

a) Vertauschungsrelationen

$$[a_i, a_j^\dagger]_+ = a_i a_j^\dagger + a_j^\dagger a_i = \delta_{ij} \quad \text{Elektronen (Fermionen)}$$

$$[b_i, b_j^\dagger]_- = b_i b_j^\dagger - b_j^\dagger b_i = \delta_{ij} \quad \text{Loseschwingg. (Bosonen)}$$

$$[a_i^\dagger, a_j^\dagger]_+ = a_i^\dagger a_j^\dagger + a_j^\dagger a_i^\dagger = 0 \quad \rightarrow \text{Fermiprinzip}$$

$$[b_i^\dagger, b_j^\dagger]_+ = b_i^\dagger b_j^\dagger + b_j^\dagger b_i^\dagger = 0 \quad \rightarrow \text{Bosekondensation}$$

b) Wirkung auf Zustände $|n_1, n_2, n_3, \dots\rangle \equiv |\{n_i\}, N\rangle$

$|n_1, n_2, n_3, \dots, n_i\rangle \hat{=} \text{Zustand mit } n_i \text{ Quanta in der } i\text{-ten Mode}$

(anti) symmetrisiert Zahl der Quanta $N = \sum_i n_i$

$$|\{n_i\}, N\rangle = \prod_i a_i^{n_i} |\{0\}, 0\rangle \quad |\{n_i\}, N\rangle = \prod_i \frac{(b_i^\dagger)^{n_i}}{n_i!} |\{0\}, 0\rangle$$

$$a_i^\dagger a_i |\{n_i\}, N\rangle = n_i |\{n_i\}, N\rangle \quad b_i^\dagger b_i |\{n_i\}, N\rangle = n_i |\{n_i\}, N\rangle$$

$n_i = 0, 1$, Fermionen

$n_i = 0, 1, 2, \dots$, Bosonen

$$a_i |\dots n_i \dots\rangle = \sqrt{n_i} (-1)^{\sum_{j < i} n_j} |\dots n_i - 1 \dots\rangle$$

$$a_i^\dagger |\dots n_i \dots\rangle = \sqrt{1 + n_i} (-1)^{\sum_{j < i} n_j} |\dots n_i + 1 \dots\rangle$$

$$b_i |\dots n_i \dots\rangle = \sqrt{n_i} |\dots n_i - 1 \dots\rangle$$

$$b_i^\dagger |\dots n_i \dots\rangle = \sqrt{1 + n_i} |\dots n_i + 1 \dots\rangle$$

c) Einbildzustände

$$|i\rangle \rightarrow \langle r, s | i \rangle = \varphi_i(\vec{r}) \chi_{s_i}(s)$$

↑ Ort
↑ Spin
↑

vollständiges System in Ort und Spin

keine: $\vec{\chi}_{s_i} = \left\{ \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \right\}$

$s_i = +, -$

ist: $\chi_{+\frac{1}{2}}(s) = \begin{cases} 1 & s = +\frac{1}{2} \\ 0 & s = -\frac{1}{2} \end{cases}, \chi_{-\frac{1}{2}}(s) = \begin{cases} 0 & s = +\frac{1}{2} \\ 1 & s = -\frac{1}{2} \end{cases}$

Analogie $\int d^3\vec{r} \varphi_i^*(\vec{r}) \varphi_j(\vec{r}) = \delta_{ij}, \sum_{s=\pm\frac{1}{2}} \chi_{s_i}^*(s) \chi_{s_j}(s) = \delta_{s_i s_j}$

d) Matrixelemente

1. Teil $\sum_{ij} \langle i | H_0 | j \rangle a_i^\dagger a_j = \sum_{ij} \int d^3\vec{r} \sum_s \varphi_i^*(\vec{r}) \chi_{s_i}^*(s) \underbrace{H_0(\vec{r}, \vec{p}, s)}_{\text{Einbildoperator}} \varphi_j(\vec{r}) \chi_{s_j}(s) a_i^\dagger a_j$

H_0 sei nicht spinabhängig, und wenn $H_0 \varphi_j(\vec{r}) = \epsilon_j \varphi_j(\vec{r})$

$$\sum_{ij} \langle i | H_0 | j \rangle a_i^\dagger a_j = \sum_i \epsilon_i a_i^\dagger a_i$$

2. Teil

$$\frac{1}{2} \sum_{ij'ke} \underbrace{\langle i, j' | V(\vec{r}_i, \vec{r}_{i'}, s, s') | k, e' \rangle}_{V_{ij'ke}} a_i^\dagger a_{j'}^\dagger a_e a_k$$

$$= \frac{1}{2} \sum_{ijk\ell} \int d^3r \int d^3r' \sum_{s, s'} \chi_{s_i}^*(s) \varphi_i^*(\vec{r}) \chi_{s_j}^*(s') \varphi_j^*(\vec{r}')$$

$$\cdot V(\vec{r}_1, \vec{r}'_1, s_1, s'_1)$$

$$\chi_{s_k}(s) \varphi_k(\vec{r}) \chi_{s_\ell}(s') \varphi_\ell(\vec{r}') a_i^\dagger a_j^\dagger a_\ell a_k$$

ohne Spatikhängigkeit von V

$$= \sum_{ijk\ell} \frac{1}{2} \int d^3r \int d^3r' \varphi_i^*(\vec{r}) \varphi_j^*(\vec{r}') V(\vec{r}, \vec{r}') \varphi_k(\vec{r}) \varphi_\ell(\vec{r}') \delta_{s_i, s_k} \delta_{s_j, s_\ell} + a_{s_i}^\dagger a_{s_j}^\dagger a_{s_\ell} a_{s_k}$$

e) beobachtbare Größen

identische Teilchen

$$\rho(\vec{r}_1, t) = \sum_i q_i \delta(\vec{r} - \vec{r}_i) \rightarrow \sum_{ij} q \langle i | \delta(\vec{r} - \vec{r}') | j \rangle a_i^\dagger a_j$$

$$\begin{aligned} \rho(\vec{r}, t) &= q \sum_{ij} \int d^3r' \sum_s \varphi_i^*(\vec{r}') \chi_{s_i}(s) \delta(\vec{r} - \vec{r}') \varphi_j(\vec{r}) \chi_{s_j}(s) a_{s_i}^\dagger a_{s_j} \\ &= q \sum_{ij} \varphi_i^*(\vec{r}) \varphi_j(\vec{r}) \underbrace{a_{s_i}^\dagger a_{s_j}}_{\text{sind zu berechnen}} \end{aligned}$$

Plan: H für Festkörper in 2. Q. formulieren.

gestucht $\langle a_i^\dagger a_j \rangle = ?$ um beobachtbare Größen zu berechnen

3. Ein Beispiel f. Born-Oppenheims Grundzustand:

homogenes Elektronengas als Bsp. f. einfache Metalle

3.1. Jelliummodell d. Elektronengases

1 Valenzelektron pro Ion, Valenzelektron werden v. allen Ionen geteilt
f. chem. Bindung wenn Ionen mehr Nachbarn als Valenzelektron haben
(metall. Bindung)

Modell: Elektron bewegen sich vor dem verschmierten Ionen Hintergrund



a) Ionendichte $\frac{N_+}{V} = n_{ion} = \text{konstant}$

Ionenzahl N_+

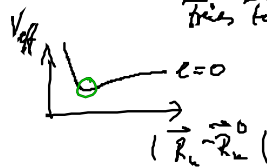
b) Ladungsneutralität $N_+ = N_-$

c) Elektronen:

$H_0 = T_{el} + V_G = \frac{\vec{p}^2}{2m} + V_G(\vec{r})$, V_G : Ionenpotential durch
"freies H"
verschmierten Ionendichte

Wahl der Einzelchenfunktionen: $\langle \vec{r}_i | s_i \rangle = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{-i\vec{k}_i \cdot \vec{r}} \chi_{s_i}(s_i)$
Freis Teilchen und Spin s_i

gesetzt: $V_{eff} = V_{ion-ion} + \bar{F}_{el}$
Ionen sind Ionenbewegung



Vorgehen: $\frac{V_{ion-ion}}{(b)}$, \bar{F}_{el} aus $(T_{el} + V_G + V_{coul}) \varphi_e(i_4) = \bar{F}_{el} \varphi_e(i_4)$
(a) (c) (d)

3.2. Hamiltonoperator d. Jelliummodells

a) kinetische Energie

$$T_{el} = \sum_{\vec{k}_1, s_1} \langle 1 | \frac{p^2}{2m} | 2 \rangle a_{\vec{k}_1}^\dagger a_{\vec{k}_2} = \sum_{\vec{k}_1} \epsilon_{\vec{k}_1} a_{\vec{k}_1}^\dagger a_{\vec{k}_1} = \sum_{\vec{k}_1} \frac{\hbar^2 k_1^2}{2m} a_{\vec{k}_1, s_1}^\dagger a_{\vec{k}_1, s_1} \quad \text{nach 2.6.}$$

genauer: $\sum_{\substack{s_1, s_2 \\ k_1, k_2}} \int d^3r \sum_s \chi_{s_1}^*(s) \frac{e^{-i\vec{k}_1 \cdot \vec{r}}}{\sqrt{V}} \frac{p^2}{2m} \frac{e^{i\vec{k}_2 \cdot \vec{r}}}{\sqrt{V}} \chi_{s_2}(s) a_{s_1, k_1}^\dagger a_{s_2, k_2}$

$$= \sum_{s_1} \sum_{k_1, k_2} \int d^3r \frac{e^{-i(\vec{k}_1 - \vec{k}_2) \cdot \vec{r}}}{V} \frac{\hbar^2 k_2^2}{2m} a_{s_1, k_1}^\dagger a_{s_2, k_2}$$

$$= \sum_{s_1} \sum_{k_1, k_2} \frac{(2\pi)^3}{V} \delta(\vec{k}_1 - \vec{k}_2) \frac{\hbar^2 k_2^2}{2m} a_{s_1, k_1}^\dagger a_{s_2, k_2}$$

$$= \sum_{s_1, k_1} \int \frac{d^3k_2}{(2\pi)^3} \delta(\vec{k}_1 - \vec{k}_2) (2\pi)^3 \frac{\hbar^2 k_2^2}{2m} a_{s_1, k_1}^\dagger a_{s_2, k_2}$$

$H = \sum_{s_1, k_1} \frac{\hbar^2 k_1^2}{2m} a_{s_1, k_1}^\dagger a_{s_1, k_1}$

kinetische Energie d. Elektron d. Fermionmodell

b) Ion-Ion-Wechselwirkung

$$V_{ion-ion} = \frac{1}{2} \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \sum_{i, n} \frac{q_i q_n}{|\vec{r}_i^0 - \vec{r}_n^0|} \xrightarrow{\text{Fermion}} \frac{1}{2} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \sum_{i, n} \left| \frac{1}{\vec{r}_i^0 - \vec{r}_n^0} \right|$$

↑
Ionenpositionen q_i, q_n

$$\sum_n = \frac{\Delta V}{\Delta V} \sum_n = \frac{1}{\Delta V} \sum_n \Delta V \rightarrow \int dV u_{ion}$$

↑
Volumenelement ΔV in der Ionverteilung ist $\frac{1}{\Delta V} = \text{Iondichte} = n_{ion} = \text{konstant}$

$$\begin{aligned}
 V_{ion-ion} &= \frac{1}{2} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \int d^3R \int d^3R' \frac{q_{ion}^2}{|\vec{R}-\vec{R}'|} e^{-\alpha|\vec{R}-\vec{R}'|} \\
 &= \frac{1}{2} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{N^2}{V^2} \int d^3R \int d^3R' \frac{e^{-\alpha R'}}{R'} \quad \begin{array}{l} \text{Koord. Info} \\ \vec{R}' \rightarrow \vec{R}-\vec{R} \end{array} \\
 &= \frac{1}{2} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{N^2}{V} \underbrace{\int d\varphi \int \sin\theta d\theta}_{4\pi} \underbrace{\int dR' R'^2}_{\frac{1}{\alpha^2}} \frac{e^{-\alpha R'}}{R'}
 \end{aligned}$$

Konvergenzfaktor
 abgeschwächte Potentiale
 am Ende $\alpha \rightarrow 0$
 für alle Terme

$$\boxed{V_{ion-ion} = \frac{e^2}{2\epsilon_0} \frac{N^2}{V} \frac{1}{\alpha^2}}$$

Ion-Ion - WW im jelliummodell.

c) Elektron im Ionenfeld

$$\begin{aligned}
 V_G &= \sum_{r_1, r_2} \langle 1 | \frac{-e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{|\vec{r}-\vec{r}_0|} | 2 \rangle a_1^+ a_2 \\
 &= \sum_{\substack{s_1, s_2 \\ k_1, k_2}} \int d^3r \sum_s \chi_{s_1}^*(s) \frac{e^{-i\vec{k}_1 \cdot \vec{r}}}{\sqrt{V}} \sum_s \frac{-e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^{-\alpha|\vec{r}-\vec{r}_0|}}{|\vec{r}-\vec{r}_0|} \chi_{s_2}(s) \frac{e^{i\vec{k}_2 \cdot \vec{r}}}{\sqrt{V}} a_{s_1 k_1}^+ a_{s_2 k_2} \\
 &= \sum_{\substack{s_1 \\ k_1, k_2}} \int d^3r \frac{e^{-i(\vec{k}_1 - \vec{k}_2) \cdot \vec{r}}}{V} \frac{-e^2}{4\pi\epsilon_0} \underbrace{\int d^3R \frac{q_{ion}}{R} e^{-\alpha R}}_{\frac{4\pi}{\alpha^2} q_{ion}}
 \end{aligned}$$

$$\boxed{V_G = \sum_{s_1 k_1} \frac{-e^2 N}{\epsilon_0 v_{k_1}^2} a_{s_1 k_1}^\dagger a_{s_1 k_1}} = -\frac{e^2 N}{\epsilon_0 v_{k_1}^2} \cdot N_{el}$$

Seltzer - (ok) - WW im jellium model
festzahlzahl

d) Seltzer - Seltzer - WW

$$V_{col} = \frac{1}{2} \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \sum_{1,2,3,4} \underbrace{\langle 1,2 | \frac{e^2}{|\vec{r}-\vec{r}'|} | 3,4 \rangle}_{\vec{r}=\vec{r}_1, \vec{r}'=\vec{r}_2} a_1^\dagger a_2^\dagger a_4 a_3$$

$$* = \int d^3r_1 \int d^3r_2 \sum_{s_1 s_1'} \chi_{s_1}(s) e^{-i\vec{k}_1 \cdot \vec{r}_1} \chi_{s_2}(s') e^{-i\vec{k}_2 \cdot \vec{r}_2} \frac{e^2}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} e^{-\alpha |\vec{r}_1 - \vec{r}_2|}$$

$$\chi_{s_3}(s) e^{i\vec{k}_3 \cdot \vec{r}_1} \chi_{s_4}(s') e^{i\vec{k}_4 \cdot \vec{r}_2}$$

neue koordinate:

$$= \left(\begin{array}{l} \vec{r} \equiv \vec{r}_1 - \vec{r}_2, \quad \vec{R} = \frac{\vec{r}_1 + \vec{r}_2}{2} \\ \vec{r}_1 = \frac{1}{2} \vec{r} + \vec{R}, \quad \vec{r}_2 = -\frac{1}{2} \vec{r} + \vec{R} \end{array} \right)$$

$$= e^2 \delta_{s_1 s_3} \delta_{s_2 s_4} \cdot \frac{1}{V} \int d^3R e^{-i(\vec{k}_1 - \vec{k}_3) \cdot \vec{R}} e^{-i(\vec{k}_2 - \vec{k}_4) \cdot \vec{R}} \stackrel{1}{=} \mathbb{I}_1$$

$$\cdot \frac{1}{V} \int d^3r e^{-\frac{i}{2}(\vec{k}_1 - \vec{k}_3) \cdot \vec{r}} e^{\frac{i}{2}(\vec{k}_2 - \vec{k}_4) \cdot \vec{r}} \frac{1}{|\vec{r}|} \stackrel{2}{=} \mathbb{I}_2$$

das erste Integral \rightarrow Kronecker δ in k :

$$\mathbb{I}_1 = \frac{(2\pi)^3}{V} \delta(\vec{k}_1 - \vec{k}_3 + \vec{k}_2 - \vec{k}_4)$$

da zweite Teilteil \rightarrow Kugelkoordinat

$$\vec{r}_2 = \frac{q\vec{r}}{|\vec{k}_1 - \vec{k}_3|^2 + \alpha^2}$$

$$V_{\text{Coul}} = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^4 \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{|\vec{k}_1 - \vec{k}_3|^2 + \alpha^2} \delta_{s_1 s_3} \delta_{s_2 s_4} \delta_{k_1 + k_2, k_3 + k_4} \begin{matrix} + & + \\ a_{k_1 s_1} & a_{k_2 s_2} \\ a_{k_3 s_3} & a_{k_4 s_4} \end{matrix}$$

Summe über alle ang. Umwandl.
 Wechselwirkungsstärke
 Impulsübertrag $\frac{1}{|\vec{k}_1 - \vec{k}_3|}$
 Auswahlregel bzgl. Spin, Impuls erhaltung
 Umwandl. von 2 Teilchen $k_4 s_4, k_3 s_3$ in 2 Teilchen $k_1 s_1, k_2 s_2$

Ausföhr. d. δ (Impulserhaltung / Spin):

$$\begin{aligned}
 k_1 &= k + q \\
 k_2 &= p - q \\
 k_3 &= k \\
 k_4 &= k_1 + k_2 - k_3 = p
 \end{aligned}$$

$$V_{\text{Coul}} = \frac{1}{2} \sum_{s_1 s_2} \sum_{q p k} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{(q^2 + \alpha^2)} \begin{matrix} + \\ a_{k+q s_1} \\ + \\ a_{p-q s_2} \\ a_{p s_2} \\ a_{k s_1} \end{matrix}$$

Feynman diagram für Coulomb WW

Coulomb-WW jellium models
 ($q \rightarrow$ räumliche Frequenz)