Teilchendichte

TECHNISCHE
UNIVERSITÄT
DARMSTADT

- $\langle n(\vec{x}) \rangle = \langle \phi_0 | \psi^\dagger(\vec{x}) \psi(\vec{x}) | \phi_0 \rangle$

Teilchendichte

TECHNISCHE UNIVERSITÄT DARMSTADT

- $\langle n(\vec{x}) \rangle = \langle \phi_0 | \psi^\dagger(\vec{x}) \psi(\vec{x}) | \phi_0 \rangle$

$$= \frac{1}{V} \sum_{\vec{k}',\vec{k}} \sum_{s',s} e^{-i\vec{k}'\cdot\vec{x}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{x}} \underbrace{\langle \phi_0 | a^\dagger_{\vec{k}',s'} a_{\vec{k},s} | \phi_0 \rangle}_{\delta_{\vec{k}',\vec{k}}\,\delta_{s',s}\,n_{\vec{k},s}}$$

Teilchendichte

TECHNISCHE UNIVERSITÄT DARMSTADT

- $\langle n(\vec{x})\rangle = \langle\phi_0|\psi^\dagger(\vec{x})\psi(\vec{x})|\phi_0\rangle$

$$= \frac{1}{V}\sum_{\vec{k}',\vec{k}}\sum_{s',s} e^{-i\vec{k}'\cdot\vec{x}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{x}} \underbrace{\langle\phi_0|a^\dagger_{\vec{k}',s'} a_{\vec{k},s}|\phi_0\rangle}_{\delta_{\vec{k}',\vec{k}}\,\delta_{s',s}\,n_{\vec{k},s}} = \frac{1}{V}\sum_{\vec{k},s} n_{\vec{k},s}$$

Teilchendichte

TECHNISCHE UNIVERSITÄT DARMSTADT

- $\langle n(\vec{x})\rangle = \langle \phi_0 | \psi^\dagger(\vec{x})\psi(\vec{x})|\phi_0\rangle$

$$= \frac{1}{V}\sum_{\vec{k}',\vec{k}}\sum_{s',s} e^{-i\vec{k}'\cdot\vec{x}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{x}} \underbrace{\langle \phi_0 | a^\dagger_{\vec{k}',s'} a_{\vec{k},s} | \phi_0\rangle}_{\delta_{\vec{k}',\vec{k}}\,\delta_{s',s}\,n_{\vec{k},s}} = \frac{1}{V}\sum_{\vec{k},s} n_{\vec{k},s} = \frac{N}{V} = n$$

Teilchendichte

- $\langle n(\vec{x})\rangle = \langle\phi_0|\psi^\dagger(\vec{x})\psi(\vec{x})|\phi_0\rangle$

$$= \frac{1}{V}\sum_{\vec{k}',\vec{k}}\sum_{s',s} e^{-i\vec{k}'\cdot\vec{x}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{x}} \underbrace{\langle\phi_0|a^\dagger_{\vec{k}',s'} a_{\vec{k},s}|\phi_0\rangle}_{\delta_{\vec{k}',\vec{k}}\,\delta_{s',s}\,n_{\vec{k},s}} = \frac{1}{V}\sum_{\vec{k},s} n_{\vec{k},s} = \frac{N}{V} = n$$

- Die Dichte $\langle n(\vec{x})\rangle$ hängt nicht vom Ort $\vec{x}$ ab!

  Das ergibt sich nicht von vornherein aus der Definition: $\langle ... \rangle$ bezeichnet den quantenmechanischen Erwartungswert und nicht eine räumliche Mittelung.

  Die Wahrscheinlichkeit, ein (oder mehrere) Teilchen zu finden, ist also an jedem Ort im Volumen V gleich groß. Physikalisch war das natürlich zu erwarten, da es keine Wechselwirkungen und damit keine ausgezeichneten Orte gibt.

Paarverteilungsfunktion

TECHNISCHE UNIVERSITÄT DARMSTADT

- Paarverteilungsfunktion:

  $g_{ss'}(\vec{x}, \vec{x}') = \mathcal{N} \langle \phi_0 | \psi_s^\dagger(\vec{x}) \psi_{s'}^\dagger(\vec{x}') \psi_{s'}(\vec{x}') \psi_s(\vec{x}) | \phi_0 \rangle$

  $\propto$ zur Wahrscheinlichkeit, ein Teilchen mit Spin s' am Ort $\vec{x}'$ zu finden, wenn sich ein zweites Teilchen mit Spin s am Ort $\vec{x}$ befindet

Paarverteilungsfunktion

- Paarverteilungsfunktion:

  $g_{ss'}(\vec{x}, \vec{x}') = \mathcal{N} \langle \phi_0 | \psi_s^\dagger(\vec{x}) \psi_{s'}^\dagger(\vec{x}') \psi_{s'}(\vec{x}') \psi_s(\vec{x}) | \phi_0 \rangle$

  $\propto$ zur Wahrscheinlichkeit, ein Teilchen mit Spin s' am Ort $\vec{x}'$ zu finden, wenn sich ein zweites Teilchen mit Spin s am Ort $\vec{x}$ befindet

  - $|\phi'_s(\vec{x})\rangle = \psi_s(\vec{x})|\phi_0\rangle$: Zustand, der sich aus dem Grundzustand ergibt, wenn man am Ort $\vec{x}$ ein Teilchen mit Spin s entfernt.

    $\Rightarrow \;\; g_{ss'}(\vec{x}, \vec{x}') \propto \langle \phi'_s(\vec{x}) | n_{s'}(\vec{x}') | \phi'_s(\vec{x}) \rangle$

Paarverteilungsfunktion

TECHNISCHE UNIVERSITÄT DARMSTADT

- Paarverteilungsfunktion:

  $g_{ss'}(\vec{x},\vec{x}\,') = \mathcal{N}\langle\phi_0|\psi_s^\dagger(\vec{x})\psi_{s'}^\dagger(\vec{x}\,')\psi_{s'}(\vec{x}\,')\psi_s(\vec{x})|\phi_0\rangle$

  $\propto$ zur Wahrscheinlichkeit, ein Teilchen mit Spin s' am Ort $\vec{x}\,'$ zu finden, wenn sich ein zweites Teilchen mit Spin s am Ort $\vec{x}$ befindet

  - $|\phi_s'(\vec{x})\rangle = \psi_s(\vec{x})|\phi_0\rangle$: Zustand, der sich aus dem Grundzustand ergibt, wenn man am Ort $\vec{x}$ ein Teilchen mit Spin s entfernt.

    $\Rightarrow\ g_{ss'}(\vec{x},\vec{x}\,') \propto \langle\phi_s'(\vec{x})|n_{s'}(\vec{x}\,')|\phi_s'(\vec{x})\rangle$

  - $\mathcal{N}$ = Normierungsfaktor,
    wird so gewählt, dass sich im unkorrelierten Fall $g_{ss'}(\vec{x},\vec{x}\,') = 1$ ergibt:

    $$\mathcal{N}^{-1} = \langle\phi_0|\psi_s^\dagger(\vec{x})\psi_s(\vec{x})|\phi_0\rangle\langle\phi_0|\psi_{s'}^\dagger(\vec{x}\,')\psi_{s'}(\vec{x}\,')|\phi_0\rangle = \left(\frac{n}{2}\right)^2 \ \Rightarrow\ \mathcal{N} = \left(\frac{2}{n}\right)^2$$

Paarverteilungsfunktion

TECHNISCHE UNIVERSITÄT DARMSTADT

- Paarverteilungsfunktion:

  $$g_{ss'}(\vec{x},\vec{x}') = \mathcal{N}\langle\phi_0|\psi_s^\dagger(\vec{x})\psi_{s'}^\dagger(\vec{x}')\psi_{s'}(\vec{x}')\psi_s(\vec{x})|\phi_0\rangle$$

  $\propto$ zur Wahrscheinlichkeit, ein Teilchen mit Spin s' am Ort $\vec{x}'$ zu finden, wenn sich ein zweites Teilchen mit Spin s am Ort $\vec{x}$ befindet

  - $|\phi_s'(\vec{x})\rangle = \psi_s(\vec{x})|\phi_0\rangle$: Zustand, der sich aus dem Grundzustand ergibt, wenn man am Ort $\vec{x}$ ein Teilchen mit Spin s entfernt.

    $$\Rightarrow \; g_{ss'}(\vec{x},\vec{x}') \propto \langle\phi_s'(\vec{x})|n_{s'}(\vec{x}')|\phi_s'(\vec{x})\rangle$$

  - $\mathcal{N}$ = Normierungsfaktor, wird so gewählt, dass sich im unkorrelierten Fall $g_{ss'}(\vec{x},\vec{x}') = 1$ ergibt:

    $$\mathcal{N}^{-1} = \langle\phi_0|\psi_s^\dagger(\vec{x})\psi_s(\vec{x})|\phi_0\rangle\langle\phi_0|\psi_{s'}^\dagger(\vec{x}')\psi_{s'}(\vec{x}')|\phi_0\rangle = \left(\frac{n}{2}\right)^2 \;\Rightarrow\; \mathcal{N} = \left(\frac{2}{n}\right)^2$$

$$\Rightarrow \; g_{ss'}(\vec{x},\vec{x}') = \left(\frac{2}{n}\right)^2 \frac{1}{V^2} \sum_{\vec{k},\vec{k}',\vec{q},\vec{q}'} e^{-i(\vec{k}-\vec{k}')\cdot\vec{x}} e^{-i(\vec{q}-\vec{q}')\cdot\vec{x}'} \langle\phi_0|a_{\vec{k},s}^\dagger a_{\vec{q},s'}^\dagger a_{\vec{q}',s'} a_{\vec{k}',s}|\phi_0\rangle$$

- Bedingungen für $\langle\phi_0|a^\dagger_{\vec{k},s}a^\dagger_{\vec{q},s'}a_{\vec{q}',s'}a_{\vec{k}',s}|\phi_0\rangle \neq 0$:

- Bedingungen für $\langle\phi_0|a^\dagger_{\vec{k},s}a^\dagger_{\vec{q},s'}a_{\vec{q}',s'}a_{\vec{k}',s}|\phi_0\rangle \neq 0$:

  1.) $|\vec{k}|$, $|\vec{k}'|$, $|\vec{q}|$, $|\vec{q}'| \leq k_F$,

  da sonst $a_{\vec{q}',s'}a_{\vec{k}',s}|\phi_0\rangle = 0$ oder $\langle\phi_0|a^\dagger_{\vec{k},s}a^\dagger_{\vec{q},s'} = 0$

TECHNISCHE UNIVERSITÄT DARMSTADT

- Bedingungen für $\langle\phi_0|a^\dagger_{\vec{k},s}a^\dagger_{\vec{q},s'}a_{\vec{q}',s'}a_{\vec{k}',s}|\phi_0\rangle \neq 0$:

  1.) $|\vec{k}|, |\vec{k}'|, |\vec{q}|, |\vec{q}'| \leq k_F$,
  da sonst $a_{\vec{q}',s'}a_{\vec{k}',s}|\phi_0\rangle = 0$ oder $\langle\phi_0|a^\dagger_{\vec{k},s}a^\dagger_{\vec{q},s'} = 0$

  2.) Falls $s = s'$, muss $\vec{k} \neq \vec{q}$ und $\vec{k}' \neq \vec{q}'$ gelten,
  da die Einteilchenzustände nicht doppelt besetzt sein können.

- Bedingungen für $\langle\phi_0|a^\dagger_{\vec{k},s}a^\dagger_{\vec{q},s'}a_{\vec{q}',s'}a_{\vec{k}',s}|\phi_0\rangle \neq 0$:

  1.) $|\vec{k}|$, $|\vec{k}'|$, $|\vec{q}|$, $|\vec{q}'| \leq k_F$,
  da sonst $a_{\vec{q}',s'}a_{\vec{k}',s}|\phi_0\rangle = 0$ oder $\langle\phi_0|a^\dagger_{\vec{k},s}a^\dagger_{\vec{q},s'} = 0$

  2.) Falls $s = s'$, muss $\vec{k} \neq \vec{q}$ und $\vec{k}' \neq \vec{q}'$ gelten,
  da die Einteilchenzustände nicht doppelt besetzt sein können.

  3.) Damit das Produkt der resultierenden Bra- und Ket-Zustände nicht verschwindet, muss gelten:
  $$\left(\vec{k} = \vec{k}' \quad \text{und} \quad \vec{q} = \vec{q}'\right) \quad \text{oder} \quad \left(\vec{k} = \vec{q}' \quad \text{und} \quad \vec{q} = \vec{k}' \quad \text{und} \quad s = s'\right)$$

- Bedingungen für $\langle\phi_0|a^\dagger_{\vec{k},s} a^\dagger_{\vec{q},s'} a_{\vec{q}',s'} a_{\vec{k}',s}|\phi_0\rangle \neq 0$:

  1.) $|\vec{k}|, |\vec{k}'|, |\vec{q}|, |\vec{q}'| \leq k_F$,
  da sonst $a_{\vec{q}',s'} a_{\vec{k}',s}|\phi_0\rangle = 0$ oder $\langle\phi_0|a^\dagger_{\vec{k},s} a^\dagger_{\vec{q},s'} = 0$

  2.) Falls $s = s'$, muss $\vec{k} \neq \vec{q}$ und $\vec{k}' \neq \vec{q}'$ gelten,
  da die Einteilchenzustände nicht doppelt besetzt sein können.

  3.) Damit das Produkt der resultierenden Bra- und Ket-Zustände nicht verschwindet, muss gelten:
  $\left(\vec{k} = \vec{k}' \quad \text{und} \quad \vec{q} = \vec{q}'\right) \quad \text{oder} \quad \left(\vec{k} = \vec{q}' \quad \text{und} \quad \vec{q} = \vec{k}' \quad \text{und} \quad s = s'\right)$

$$\Rightarrow \quad g_{ss'}(\vec{x}, \vec{x}') = \left(\frac{2}{n}\right)^2 \frac{1}{V^2} \sum_{\substack{\vec{k},\vec{k}',\vec{q},\vec{q}' \\ \in \text{Fermi-Kugel}}} e^{-i(\vec{k}-\vec{k}')\cdot\vec{x}} e^{-i(\vec{q}-\vec{q}')\cdot\vec{x}'} \left(\delta_{\vec{k},\vec{k}'}\delta_{\vec{q},\vec{q}'} - \delta_{\vec{k},\vec{q}'}\delta_{\vec{q},\vec{k}'}\delta_{s,s'}\right)$$

TECHNISCHE UNIVERSITÄT DARMSTADT

- Bedingungen für $\langle\phi_0|a^\dagger_{\vec{k},s}a^\dagger_{\vec{q},s'}a_{\vec{q}',s'}a_{\vec{k}',s}|\phi_0\rangle \neq 0$:

  1.) $|\vec{k}|, |\vec{k}'|, |\vec{q}|, |\vec{q}'| \leq k_F$,
  da sonst $a_{\vec{q}',s'}a_{\vec{k}',s}|\phi_0\rangle = 0$ oder $\langle\phi_0|a^\dagger_{\vec{k},s}a^\dagger_{\vec{q},s'} = 0$

  2.) Falls $s = s'$, muss $\vec{k} \neq \vec{q}$ und $\vec{k}' \neq \vec{q}'$ gelten,
  da die Einteilchenzustände nicht doppelt besetzt sein können.

  3.) Damit das Produkt der resultierenden Bra- und Ket-Zustände nicht verschwindet, muss gelten:
  $\left(\vec{k} = \vec{k}' \quad \text{und} \quad \vec{q} = \vec{q}'\right) \quad \text{oder} \quad \left(\vec{k} = \vec{q}' \quad \text{und} \quad \vec{q} = \vec{k}' \quad \text{und} \quad s = s'\right)$

$$\Rightarrow \; g_{ss'}(\vec{x},\vec{x}') = \left(\frac{2}{n}\right)^2 \frac{1}{V^2} \sum_{\substack{\vec{k},\vec{k}',\vec{q},\vec{q}' \\ \in \text{Fermi-Kugel}}} e^{-i(\vec{k}-\vec{k}')\cdot\vec{x}} e^{-i(\vec{q}-\vec{q}')\cdot\vec{x}'} \left(\delta_{\vec{k},\vec{k}'}\delta_{\vec{q},\vec{q}'} - \delta_{\vec{k},\vec{q}'}\delta_{\vec{q},\vec{k}'}\delta_{s,s'}\right)$$

$$= \left(\frac{2}{N}\right)^2 \sum_{\vec{k},\vec{q}\in\text{F.-K.}} \left(1 - \delta_{s,s'}\, e^{-i(\vec{k}-\vec{q})\cdot(\vec{x}-\vec{x}')}\right)$$

- $g_{ss'}(\vec{x},\vec{x}') = \left(\frac{2}{N}\right)^2 \sum_{\vec{k},\vec{q}\in\text{F.-K.}} \left(1 - \delta_{s,s'}\, e^{-i(\vec{k}-\vec{q})\cdot(\vec{x}-\vec{x}')}\right)$

- $g_{ss'}(\vec{x}, \vec{x}') = \left(\frac{2}{N}\right)^2 \sum_{\vec{k},\vec{q} \in \text{F.-K.}} \left(1 - \delta_{s,s'}\, e^{-i(\vec{k}-\vec{q})\cdot(\vec{x}-\vec{x}')}\right)$
- $\sum_{\vec{k},\vec{q} \in \text{F.-K.}} 1 = \left(\sum_{\vec{k} \in \text{F.-K.}} 1\right)^2 = \left(\frac{N}{2}\right)^2$

- $g_{ss'}(\vec{x},\vec{x}\,') = \left(\frac{2}{N}\right)^2 \sum_{\vec{k},\vec{q}\in\text{F.-K.}} \left(1 - \delta_{s,s'}\, e^{-i(\vec{k}-\vec{q})\cdot(\vec{x}-\vec{x}\,')}\right)$

- $\sum_{\vec{k},\vec{q}\in\text{F.-K.}} 1 = \left(\sum_{\vec{k}\in\text{F.-K.}} 1\right)^2 = \left(\frac{N}{2}\right)^2$

- $$\sum_{\vec{k},\vec{q}\in\text{F.-K.}} e^{-i(\vec{k}-\vec{q})\cdot(\vec{x}-\vec{x}\,')} = \left(\sum_{\vec{k}\in\text{F.-K.}} e^{-i\vec{k}\cdot(\vec{x}-\vec{x}\,')}\right)\left(\sum_{\vec{q}\in\text{F.-K.}} e^{i\vec{q}\cdot(\vec{x}-\vec{x}\,')}\right)$$
  $$= \left(\sum_{\vec{k}\in\text{F.-K.}} e^{+i\vec{k}\cdot(\vec{x}-\vec{x}\,')}\right)^2, \quad \text{da die Summe } \pm\vec{k} \text{ enthält.}$$

TECHNISCHE UNIVERSITÄT DARMSTADT

- $$g_{ss'}(\vec{x},\vec{x}') = \left(\frac{2}{N}\right)^2 \sum_{\vec{k},\vec{q}\in \text{F.-K.}} \left(1 - \delta_{s,s'}\, e^{-i(\vec{k}-\vec{q})\cdot(\vec{x}-\vec{x}')}\right)$$
- $$\sum_{\vec{k},\vec{q}\in \text{F.-K.}} 1 = \Bigg(\sum_{\vec{k}\in \text{F.-K.}} 1\Bigg)^2 = \left(\frac{N}{2}\right)^2$$
- $$\sum_{\vec{k},\vec{q}\in \text{F.-K.}} e^{-i(\vec{k}-\vec{q})\cdot(\vec{x}-\vec{x}')} = \Bigg(\sum_{\vec{k}\in \text{F.-K.}} e^{-i\vec{k}\cdot(\vec{x}-\vec{x}')}\Bigg)\Bigg(\sum_{\vec{q}\in \text{F.-K.}} e^{i\vec{q}\cdot(\vec{x}-\vec{x}')}\Bigg)$$

$$= \Bigg(\sum_{\vec{k}\in \text{F.-K.}} e^{+i\vec{k}\cdot(\vec{x}-\vec{x}')}\Bigg)^2, \quad \text{da die Summe } \pm\vec{k} \text{ enthält.}$$

$$\sum_{\vec{k}\in \text{F.-K.}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{y}} \longrightarrow V\int \frac{d^3k}{(2\pi)^3}\, e^{i\vec{k}\cdot\vec{y}}\,\theta(k_F - |\vec{k}|)$$

- $g_{ss'}(\vec{x},\vec{x}') = \left(\frac{2}{N}\right)^2 \sum_{\vec{k},\vec{q}\in\text{F.-K.}} \left(1 - \delta_{s,s'}\, e^{-i(\vec{k}-\vec{q})\cdot(\vec{x}-\vec{x}')}\right)$

- $\sum_{\vec{k},\vec{q}\in\text{F.-K.}} 1 = \Big(\sum_{\vec{k}\in\text{F.-K.}} 1\Big)^2 = \left(\frac{N}{2}\right)^2$

- $\sum_{\vec{k},\vec{q}\in\text{F.-K.}} e^{-i(\vec{k}-\vec{q})\cdot(\vec{x}-\vec{x}')} = \Big(\sum_{\vec{k}\in\text{F.-K.}} e^{-i\vec{k}\cdot(\vec{x}-\vec{x}')}\Big)\Big(\sum_{\vec{q}\in\text{F.-K.}} e^{i\vec{q}\cdot(\vec{x}-\vec{x}')}\Big)$

$$= \Big(\sum_{\vec{k}\in\text{F.-K.}} e^{+i\vec{k}\cdot(\vec{x}-\vec{x}')}\Big)^2, \quad \text{da die Summe } \pm\vec{k} \text{ enthält.}$$

$$\sum_{\vec{k}\in\text{F.-K.}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{y}} \longrightarrow V\int \frac{d^3k}{(2\pi)^3}\, e^{i\vec{k}\cdot\vec{y}}\theta(k_F - |\vec{k}|)$$

$$= \frac{V}{(2\pi)^2}\int_0^{k_F} k^2\,dk \int_{-1}^{1} d\cos\theta\; e^{iky\cos\theta} = \frac{V}{(2\pi)^2}\,\frac{1}{y}\int_0^{k_F} dk\, 2k\, \sin(ky)$$

$$\frac{V}{(2\pi)^2}\,\frac{1}{y}\int\limits_0^{k_F} dk\,2k\,\sin(ky) \overset{u=ky}{=} \frac{V}{2\pi^2}\,\frac{1}{y^3}\int\limits_0^{k_F y} du\,u\,\sin u$$

$$\frac{V}{(2\pi)^2}\,\frac{1}{y}\int_0^{k_F} dk\,2k\,\sin(ky) \overset{u=ky}{=} \frac{V}{2\pi^2}\,\frac{1}{y^3}\int_0^{k_F y} du\,u\,\sin u$$

$$= \frac{V}{2\pi^2}\,\frac{1}{y^3}\int_0^{k_F y} du\,u\,\Big(-\frac{d}{du}\cos u\Big)$$

$$\frac{V}{(2\pi)^2}\,\frac{1}{y}\int_0^{k_F} dk\,2k\,\sin(ky) \overset{u=ky}{=} \frac{V}{2\pi^2}\,\frac{1}{y^3}\int_0^{k_F y} du\,u\,\sin u$$

$$= \frac{V}{2\pi^2}\,\frac{1}{y^3}\int_0^{k_F y} du\,u\left(-\frac{d}{du}\cos u\right)$$

$$= \frac{V}{2\pi^2}\,\frac{1}{y^3}\left(-k_F y\cos(k_F y) + \sin(k_F y)\right)$$

$$\frac{V}{(2\pi)^2}\,\frac{1}{y}\int_0^{k_F} dk\,2k\,\sin(ky) \overset{u=ky}{=} \frac{V}{2\pi^2}\,\frac{1}{y^3}\int_0^{k_F y} du\,u\,\sin u$$

$$= \frac{V}{2\pi^2}\,\frac{1}{y^3}\int_0^{k_F y} du\,u\left(-\frac{d}{du}\cos u\right)$$

$$= \frac{V}{2\pi^2}\,\frac{1}{y^3}\left(-k_F y\cos(k_F y) + \sin(k_F y)\right)$$

$$= \frac{k_F^3 V}{2\pi^2}\,\frac{1}{\alpha^3}\left(\sin\alpha - \alpha\cos\alpha\right), \quad \alpha \equiv k_F y$$

$$
\begin{aligned}
\frac{V}{(2\pi)^2}\,\frac{1}{y}\int_0^{k_F} dk\,2k\,\sin(ky) &\overset{u=ky}{=} \frac{V}{2\pi^2}\,\frac{1}{y^3}\int_0^{k_F y} du\,u\,\sin u \\
&= \frac{V}{2\pi^2}\,\frac{1}{y^3}\int_0^{k_F y} du\,u\left(-\frac{d}{du}\cos u\right) \\
&= \frac{V}{2\pi^2}\,\frac{1}{y^3}\Big(-k_F y\cos(k_F y) + \sin(k_F y)\Big) \\
&= \frac{k_F^3 V}{2\pi^2}\,\frac{1}{\alpha^3}\Big(\sin\alpha - \alpha\cos\alpha\Big), \quad \alpha \equiv k_F y \\
&= \frac{3N}{2}\,\frac{\sin\alpha - \alpha\cos\alpha}{\alpha^3}, \quad \text{da} \quad V k_F^3 = 3\pi^2 N
\end{aligned}
$$

- $g_{ss'}(\vec{x}, \vec{x}') = \left(\frac{2}{N}\right)^2 \sum_{\vec{k},\vec{q} \in \text{F.-K.}} \left(1 - \delta_{s,s'} e^{-i(\vec{k}-\vec{q})\cdot(\vec{x}-\vec{x}')}\right)$
  - $\sum_{\vec{k},\vec{q} \in \text{F.-K.}} 1 = \left(\frac{N}{2}\right)^2$
  - $\sum_{\vec{k},\vec{q} \in \text{F.-K.}} e^{-i(\vec{k}-\vec{q})\cdot(\vec{x}-\vec{x}')} = \left(\sum_{\vec{k} \in \text{F.-K.}} e^{+i\vec{k}\cdot(\vec{x}-\vec{x}')}\right)^2 \longrightarrow \left(\frac{3N}{2}\,\frac{\sin\alpha - \alpha\cos\alpha}{\alpha^3}\right)^2,$

    $\alpha = k_F |\vec{x} - \vec{x}'|$

- $g_{ss'}(\vec{x}, \vec{x}') = \left(\frac{2}{N}\right)^2 \sum_{\vec{k},\vec{q}\in \text{F.-K.}} \left(1 - \delta_{s,s'}\, e^{-i(\vec{k}-\vec{q})\cdot(\vec{x}-\vec{x}')}\right)$
  - $\sum_{\vec{k},\vec{q}\in \text{F.-K.}} 1 = \left(\frac{N}{2}\right)^2$
  - $\sum_{\vec{k},\vec{q}\in \text{F.-K.}} e^{-i(\vec{k}-\vec{q})\cdot(\vec{x}-\vec{x}')} = \left(\sum_{\vec{k}\in \text{F.-K.}} e^{+i\vec{k}\cdot(\vec{x}-\vec{x}')}\right)^2 \longrightarrow \left(\frac{3N}{2}\,\frac{\sin\alpha - \alpha\cos\alpha}{\alpha^3}\right)^2,$

    $\alpha = k_F|\vec{x} - \vec{x}'|$

$$\Rightarrow\; g_{ss'}(\vec{x}, \vec{x}') \;=\; 1 - \delta_{s,s'}\,\frac{9}{\alpha^6}\left(\sin\alpha - \alpha\cos\alpha\right)^2 \;\equiv\; g_{ss'}(\vec{x} - \vec{x}')$$

$$\boxed{g_{ss'}(\vec{x}-\vec{x}') = 1 - \delta_{s,s'}\,\frac{9}{\alpha^6}\left(\sin\alpha - \alpha\cos\alpha\right)^2, \qquad \alpha \equiv k_F|\vec{x}-\vec{x}'|}$$

Interpretation:

$\underline{s \neq s'}$: $g_{ss'} = 1 \quad \Rightarrow$ Die Teilchen sind unkorreliert.

$\underline{s = s'}$: Aufenthaltswahrscheinlichkeit des zweiten Teilchens in der Nähe des ersten unterdrückt

$$g_{ss'}(\vec{x}-\vec{x}') = 1 - \delta_{s,s'} \frac{9}{\alpha^6}\left(\sin\alpha - \alpha\cos\alpha\right)^2, \qquad \alpha \equiv k_F|\vec{x}-\vec{x}'|$$

Interpretation:

$\underline{s \neq s'}$: $g_{ss'} = 1 \quad \Rightarrow$ Die Teilchen sind unkorreliert.

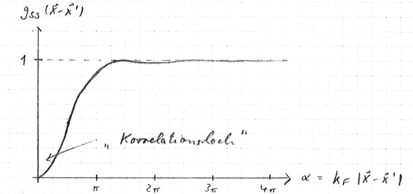
$\underline{s = s'}$: Aufenthaltswahrscheinlichkeit des zweiten Teilchens in der Nähe des ersten unterdrückt

$\alpha \ll 1$:

$$\sin\alpha - \alpha\cos\alpha$$
$$\approx (\alpha - \tfrac{1}{3!}\alpha^3) - \alpha(1 - \tfrac{1}{2!}\alpha^2) = \frac{\alpha^3}{3}$$

$\Rightarrow \quad g_{ss} = \mathcal{O}(\alpha^2)$

$\Rightarrow \quad g_{ss}(0) = 0 \quad$ (Pauli-Prinzip)



4.7 Fermion-Vielteilchensysteme
Teil 2: Elektronengas mit Coulomb-Abstoßung

TECHNISCHE UNIVERSITÄT DARMSTADT

4.7 Fermion-Vielteilchensysteme
Teil 2: Elektronengas mit Coulomb-Abstoßung

TECHNISCHE UNIVERSITÄT DARMSTADT

- Ziel:
  Berechnung des Effekts der Coulomb-Abstoßung zwischen den Elektronen im thermodynamischen Limes $V \to \infty$, $N \to \infty$, $n = \frac{N}{V} = const$.

4.7 Fermion-Vielteilchensysteme
Teil 2: Elektronengas mit Coulomb-Abstoßung

TECHNISCHE UNIVERSITÄT DARMSTADT

- Ziel:
  Berechnung des Effekts der Coulomb-Abstoßung zwischen den Elektronen im thermodynamischen Limes $V \to \infty$, $N \to \infty$, $n = \frac{N}{V} = const$.
- Problem:
  Nicht nur die Gesamtenergie E, sondern auch die Energiedichte $\varepsilon = \frac{E}{V}$ ist divergent.

4.7 Fermion-Vielteilchensysteme
Teil 2: Elektronengas mit Coulomb-Abstoßung

- Ziel:
  Berechnung des Effekts der Coulomb-Abstoßung zwischen den Elektronen im thermodynamischen Limes $V \to \infty$, $N \to \infty$, $n = \frac{N}{V} = const$.
- Problem:
  Nicht nur die Gesamtenergie E, sondern auch die Energiedichte $\varepsilon = \frac{E}{V}$ ist divergent.

  klassisches Beispiel: homogen geladene Kugel

  $E \propto R^5$, $V \propto R^3 \;\Rightarrow\; \varepsilon \propto R^2$ (bei festgehaltener Ladungsdichte)

4.7 Fermion-Vielteilchensysteme
Teil 2: Elektronengas mit Coulomb-Abstoßung

TECHNISCHE UNIVERSITÄT DARMSTADT

- Ziel:
  Berechnung des Effekts der Coulomb-Abstoßung zwischen den Elektronen im thermodynamischen Limes $V \to \infty$, $N \to \infty$, $n = \frac{N}{V} = const$.
- Problem:
  Nicht nur die Gesamtenergie E, sondern auch die Energiedichte $\varepsilon = \frac{E}{V}$ ist divergent.

  klassisches Beispiel: homogen geladene Kugel

  $E \propto R^5$, $V \propto R^3 \;\Rightarrow\; \varepsilon \propto R^2$ (bei festgehaltener Ladungsdichte)
- physikalisch sinnvoller Ausweg:
  Bette die Elektronen in einen positiven Ladungshintergrund ein
  (z.B. Ionengitter im Metall), so dass die Gesamtladung verschwindet.

- Hamilton-Operator: $$H = \underset{\substack{\uparrow \\ \text{Elektronen}}}{H_{\rm el}} + \underset{\substack{\uparrow \\ \text{Hintergrund}}}{H_{\rm H}} + \underset{\substack{\uparrow \\ \text{Elektron-Hintergrund-WW}}}{H_{\rm el-H}}$$

- Hamilton-Operator: $$H = \underset{\text{Elektronen}}{\underset{\uparrow}{H_{\text{el}}}} + \underset{\text{Hintergrund}}{\underset{\uparrow}{H_{\text{H}}}} + \underset{\text{Elektron-Hintergrund-WW}}{\underset{\uparrow}{H_{\text{el}-\text{H}}}}$$

- technischer Trick:

  Die Einzelbeiträge der drei Anteile sind nach wie vor divergent. Um sie dennoch separat berechnen zu können, verwenden wir zunächst ein

  abgeschirmtes Coulomb-Potenzial $$V(\vec{x}_i - \vec{x}_j) = q_i q_j \frac{e^{-\mu|\vec{x}_i - \vec{x}_j|}}{|\vec{x}_i - \vec{x}_j|}$$

  und bilden nach Aufsummation aller Terme den Limes $\mu \to 0$.

Hintergrundfeld

TECHNISCHE UNIVERSITÄT DARMSTADT

- klassische Ladungsverteilung: $\rho_\mathrm{H}(\vec{x}) = e\, n_\mathrm{H}(\vec{x})$

$$\Rightarrow \quad E_\mathrm{H} = H_\mathrm{H} = \frac{1}{2} e^2 \int d^3x \int d^3x'\, n_\mathrm{H}(\vec{x})\, n_\mathrm{H}(\vec{x}')\, \frac{e^{-\mu|\vec{x}-\vec{x}'|}}{|\vec{x}-\vec{x}'|}$$

Hintergrundfeld

- klassische Ladungsverteilung: $\rho_{\mathrm{H}}(\vec{x}) = e\, n_{\mathrm{H}}(\vec{x})$

$$\Rightarrow \quad E_{\mathrm{H}} = H_{\mathrm{H}} = \frac{1}{2} e^2 \int d^3x \int d^3x'\, n_{\mathrm{H}}(\vec{x})\, n_{\mathrm{H}}(\vec{x}')\, \frac{e^{-\mu|\vec{x}-\vec{x}'|}}{|\vec{x}-\vec{x}'|}$$

- Vereinfachung: homogene Ladungsverteilung: $n_{\mathrm{H}}(\vec{x}) = \frac{N}{V}, \quad N \equiv N_e = N_H$

$$\Rightarrow \quad E_{\mathrm{H}} = \frac{1}{2} e^2 \left(\frac{N}{V}\right)^2 \int d^3x \int d^3x'\, \frac{e^{-\mu|\vec{x}-\vec{x}'|}}{|\vec{x}-\vec{x}'|}$$

Hintergrundfeld

- klassische Ladungsverteilung: $\rho_\mathrm{H}(\vec{x}) = e\, n_\mathrm{H}(\vec{x})$

$$\Rightarrow \quad E_\mathrm{H} = H_\mathrm{H} = \tfrac{1}{2} e^2 \int d^3x \int d^3x'\, n_\mathrm{H}(\vec{x})\, n_\mathrm{H}(\vec{x}')\, \frac{e^{-\mu|\vec{x}-\vec{x}'|}}{|\vec{x}-\vec{x}'|}$$

- Vereinfachung: homogene Ladungsverteilung: $n_\mathrm{H}(\vec{x}) = \frac{N}{V}, \quad N \equiv N_e = N_H$

$$\Rightarrow \quad E_\mathrm{H} = \tfrac{1}{2} e^2 \left(\tfrac{N}{V}\right)^2 \int d^3x \int d^3x'\, \frac{e^{-\mu|\vec{x}-\vec{x}'|}}{|\vec{x}-\vec{x}'|}$$

$$= \tfrac{1}{2} e^2 \left(\tfrac{N}{V}\right)^2 \int d^3x \underbrace{\int d^3z\, \frac{e^{-\mu z}}{z}}_{\xrightarrow{V \gg 1/\mu^3} \frac{4\pi}{\mu^2}} \longrightarrow \tfrac{1}{2} e^2 \frac{N^2}{V} \frac{4\pi}{\mu^2}$$

Hintergrundfeld

- klassische Ladungsverteilung: $\rho_\mathrm{H}(\vec{x}) = e\, n_\mathrm{H}(\vec{x})$

$$\Rightarrow \quad E_\mathrm{H} = H_\mathrm{H} = \tfrac{1}{2} e^2 \int d^3x \int d^3x'\, n_\mathrm{H}(\vec{x})\, n_\mathrm{H}(\vec{x}')\, \frac{e^{-\mu|\vec{x}-\vec{x}'|}}{|\vec{x}-\vec{x}'|}$$

- Vereinfachung: homogene Ladungsverteilung: $n_\mathrm{H}(\vec{x}) = \frac{N}{V}, \quad N \equiv N_e = N_H$

$$\Rightarrow \quad E_\mathrm{H} = \tfrac{1}{2} e^2 \left(\tfrac{N}{V}\right)^2 \int d^3x \int d^3x'\, \frac{e^{-\mu|\vec{x}-\vec{x}'|}}{|\vec{x}-\vec{x}'|}$$

$$= \tfrac{1}{2} e^2 \left(\tfrac{N}{V}\right)^2 \int d^3x \underbrace{\int d^3z\, \frac{e^{-\mu z}}{z}}_{\xrightarrow{V \gg 1/\mu^3} \frac{4\pi}{\mu^2}} \longrightarrow \tfrac{1}{2} e^2 \frac{N^2}{V} \frac{4\pi}{\mu^2}$$

$$\Rightarrow \quad \varepsilon_\mathrm{H} = \frac{E_\mathrm{H}}{V} = \tfrac{1}{2} e^2 n^2 \frac{4\pi}{\mu^2} \qquad \text{(divergent für } \mu \to 0)$$

Elektron-Hintergrund-Wechselwirkung

TECHNISCHE UNIVERSITÄT DARMSTADT

- $H_{\mathrm{el-H}} = -e^2 \sum_{\alpha=1}^{N} \int d^3x \, n_{\mathrm{H}}(\vec{x}) \, \frac{e^{-\mu|\vec{x}-\hat{\vec{x}}_\alpha|}}{|\vec{x}-\hat{\vec{x}}_\alpha|}$ Einteilchen-Operator

Elektron-Hintergrund-Wechselwirkung

- $H_{\mathrm{el-H}} = -e^2 \sum_{\alpha=1}^{N} \int d^3x \, n_{\mathrm{H}}(\vec{x}) \, \frac{e^{-\mu|\vec{x}-\hat{\vec{x}}_\alpha|}}{|\vec{x}-\hat{\vec{x}}_\alpha|}$ Einteilchen-Operator

$$= -e^2 \int d^3x \, n_{\mathrm{H}}(\vec{x}) \, \sum_{i,j} \langle i| \frac{e^{-\mu|\vec{x}-\hat{\vec{x}}|}}{|\vec{x}-\hat{\vec{x}}|} |j\rangle \, a_i^\dagger a_j$$

Elektron-Hintergrund-Wechselwirkung

TECHNISCHE UNIVERSITÄT DARMSTADT

- $$H_{\mathrm{el-H}} = -e^2 \sum_{\alpha=1}^{N} \int d^3x \, n_{\mathrm{H}}(\vec{x}) \, \frac{e^{-\mu|\vec{x}-\hat{\vec{x}}_\alpha|}}{|\vec{x}-\hat{\vec{x}}_\alpha|}$$ Einteilchen-Operator

$$= -e^2 \int d^3x \, n_{\mathrm{H}}(\vec{x}) \, \sum_{i,j} \langle i| \frac{e^{-\mu|\vec{x}-\hat{\vec{x}}|}}{|\vec{x}-\hat{\vec{x}}|} |j\rangle \, a_i^\dagger a_j$$

$$= -e^2 \int d^3x \, n_{\mathrm{H}}(\vec{x}) \, \int d^3x' \, \frac{e^{-\mu|\vec{x}-\vec{x}'|}}{|\vec{x}-\vec{x}'|} \, \underbrace{\psi^\dagger(\vec{x}')\psi(\vec{x}')}_{\hat{n}(\vec{x}')}$$

Elektron-Hintergrund-Wechselwirkung

TECHNISCHE UNIVERSITÄT DARMSTADT

- $H_{\text{el}-\text{H}} = -e^2 \sum_{\alpha=1}^{N} \int d^3x\, n_{\text{H}}(\vec{x})\, \frac{e^{-\mu|\vec{x}-\hat{\vec{x}}_\alpha|}}{|\vec{x}-\hat{\vec{x}}_\alpha|}$ Einteilchen-Operator

$$= -e^2 \int d^3x\, n_{\text{H}}(\vec{x}) \sum_{i,j} \langle i| \frac{e^{-\mu|\vec{x}-\hat{\vec{x}}|}}{|\vec{x}-\hat{\vec{x}}|} |j\rangle\, a_i^\dagger a_j$$

$$= -e^2 \int d^3x\, n_{\text{H}}(\vec{x}) \int d^3x'\, \frac{e^{-\mu|\vec{x}-\vec{x}'|}}{|\vec{x}-\vec{x}'|}\, \underbrace{\psi^\dagger(\vec{x}')\psi(\vec{x}')}_{\hat{n}(\vec{x}')}$$

$\Rightarrow$ $E_{\text{el}-\text{H}} = \langle\phi|H_{\text{el}-\text{H}}|\phi\rangle = -e^2 \int d^3x \int d^3x'\, n_{\text{H}}(\vec{x})\, n(\vec{x}')\, \frac{e^{-\mu|\vec{x}-\vec{x}'|}}{|\vec{x}-\vec{x}'|}$

$\hat{=}$ klassische Coulomb-Energie mit $n(\vec{x}') = \langle\phi|\hat{n}(\vec{x}')|\phi\rangle$

Elektron-Hintergrund-Wechselwirkung

TECHNISCHE UNIVERSITÄT DARMSTADT

- $H_{\text{el}-\text{H}} = -e^2 \sum_{\alpha=1}^{N} \int d^3x \, n_\text{H}(\vec{x}) \, \frac{e^{-\mu|\vec{x}-\hat{\vec{x}}_\alpha|}}{|\vec{x}-\hat{\vec{x}}_\alpha|}$ Einteilchen-Operator

$$= -e^2 \int d^3x \, n_\text{H}(\vec{x}) \, \sum_{i,j} \langle i| \frac{e^{-\mu|\vec{x}-\hat{\vec{x}}|}}{|\vec{x}-\hat{\vec{x}}|} |j\rangle \, a_i^\dagger a_j$$

$$= -e^2 \int d^3x \, n_\text{H}(\vec{x}) \, \int d^3x' \, \frac{e^{-\mu|\vec{x}-\vec{x}'|}}{|\vec{x}-\vec{x}'|} \, \underbrace{\psi^\dagger(\vec{x}')\psi(\vec{x}')}_{\hat{n}(\vec{x}')}$$

$\Rightarrow$ $E_{\text{el}-\text{H}} = \langle\phi|H_{\text{el}-\text{H}}|\phi\rangle = -e^2 \int d^3x \int d^3x' \, n_\text{H}(\vec{x}) \, n(\vec{x}') \, \frac{e^{-\mu|\vec{x}-\vec{x}'|}}{|\vec{x}-\vec{x}'|}$

$\hat{=}$ klassische Coulomb-Energie mit $n(\vec{x}') = \langle\phi|\hat{n}(\vec{x}')|\phi\rangle$

- homogene Dichteverteilungen: $n(\vec{x}) = n_\text{H} = \frac{N}{V}$

$$\Rightarrow \quad E_{\text{el}-\text{H}} = -2E_\text{H} = -e^2 \frac{N^2}{V} \frac{4\pi}{\mu^2}$$

Beitrag der Elektronen

TECHNISCHE
UNIVERSITÄT
DARMSTADT

- $H_{\mathrm{el}} = \hat{T}_{\mathrm{el}} + \hat{V}_{\mathrm{el}}$

Beitrag der Elektronen

TECHNISCHE UNIVERSITÄT DARMSTADT

- $H_{\text{el}} = \hat{T}_{\text{el}} + \hat{V}_{\text{el}}$
  - $\hat{T}_{\text{el}} = \sum_{\alpha=1}^{N} \frac{\vec{p}_\alpha^{\,2}}{2m} = \sum_{\vec{k},s} \frac{\hbar^2 \vec{k}^{\,2}}{2m} a^\dagger_{\vec{k},s} a_{\vec{k},s}$

Beitrag der Elektronen

TECHNISCHE
UNIVERSITÄT
DARMSTADT

- $H_{\text{el}} = \hat{T}_{\text{el}} + \hat{V}_{\text{el}}$
  - $\hat{T}_{\text{el}} = \sum_{\alpha=1}^{N} \frac{\vec{p}_\alpha^{\,2}}{2m} = \sum_{\vec{k},s} \frac{\hbar^2 \vec{k}^{\,2}}{2m} a^\dagger_{\vec{k},s} a_{\vec{k},s}$
  - $\hat{V}_{\text{el}} = \frac{1}{2} e^2 \sum_{\alpha,\beta} \frac{e^{-\mu|\vec{x}_\alpha - \vec{x}_\beta|}}{|\vec{x}_\alpha - \vec{x}_\beta|} = \frac{1}{2V} \sum_{\vec{k},\vec{k}',\vec{q}} \sum_{s,s'} \tilde{V}(\vec{q})\, a^\dagger_{\vec{k}+\vec{q},s} a^\dagger_{\vec{k}'-\vec{q},s'} a_{\vec{k}',s'} a_{\vec{k},s}$

Beitrag der Elektronen

- $H_{\text{el}} = \hat{T}_{\text{el}} + \hat{V}_{\text{el}}$
  - $\hat{T}_{\text{el}} = \sum_{\alpha=1}^{N} \frac{\vec{p}_\alpha^{\,2}}{2m} = \sum_{\vec{k},s} \frac{\hbar^2 \vec{k}^{\,2}}{2m} a^\dagger_{\vec{k},s} a_{\vec{k},s}$
  - $\hat{V}_{\text{el}} = \frac{1}{2} e^2 \sum_{\alpha,\beta} \frac{e^{-\mu|\vec{x}_\alpha - \vec{x}_\beta|}}{|\vec{x}_\alpha - \vec{x}_\beta|} = \frac{1}{2V} \sum_{\vec{k},\vec{k}',\vec{q}} \sum_{s,s'} \tilde{V}(\vec{q})\, a^\dagger_{\vec{k}+\vec{q},s} a^\dagger_{\vec{k}'-\vec{q},s'} a_{\vec{k}',s'} a_{\vec{k},s}$

    $\tilde{V}(\vec{q}) = e^2 \int d^3z\, e^{-i\vec{q}\cdot\vec{z}}\, \frac{e^{-\mu|\vec{z}|}}{|\vec{z}|}$

Beitrag der Elektronen

- $H_{\text{el}} = \hat{T}_{\text{el}} + \hat{V}_{\text{el}}$
  - $\hat{T}_{\text{el}} = \sum_{\alpha=1}^{N} \frac{\vec{p}_\alpha^{\,2}}{2m} = \sum_{\vec{k},s} \frac{\hbar^2 \vec{k}^{\,2}}{2m} a^\dagger_{\vec{k},s} a_{\vec{k},s}$
  - $\hat{V}_{\text{el}} = \frac{1}{2} e^2 \sum_{\alpha,\beta} \frac{e^{-\mu|\vec{x}_\alpha - \vec{x}_\beta|}}{|\vec{x}_\alpha - \vec{x}_\beta|} = \frac{1}{2V} \sum_{\vec{k},\vec{k}',\vec{q}} \sum_{s,s'} \tilde{V}(\vec{q})\, a^\dagger_{\vec{k}+\vec{q},s} a^\dagger_{\vec{k}'-\vec{q},s'} a_{\vec{k}',s'} a_{\vec{k},s}$

    $\tilde{V}(\vec{q}) = e^2 \int d^3z\, e^{-i\vec{q}\cdot\vec{z}}\, \frac{e^{-\mu|\vec{z}|}}{|\vec{z}|} = \frac{4\pi\, e^2}{\mu^2 + \vec{q}^{\,2}}$

Beitrag der Elektronen

TECHNISCHE
UNIVERSITÄT
DARMSTADT

- $H_{\text{el}} = \hat{T}_{\text{el}} + \hat{V}_{\text{el}}$
  - $\hat{T}_{\text{el}} = \sum_{\alpha=1}^{N} \frac{\vec{p}_\alpha^{\,2}}{2m} = \sum_{\vec{k},s} \frac{\hbar^2 \vec{k}^{\,2}}{2m} a^\dagger_{\vec{k},s} a_{\vec{k},s}$
  - $\hat{V}_{\text{el}} = \frac{1}{2} e^2 \sum_{\alpha,\beta} \frac{e^{-\mu|\vec{x}_\alpha - \vec{x}_\beta|}}{|\vec{x}_\alpha - \vec{x}_\beta|} = \frac{1}{2V} \sum_{\vec{k},\vec{k}',\vec{q}} \sum_{s,s'} \tilde{V}(\vec{q})\; a^\dagger_{\vec{k}+\vec{q},s} a^\dagger_{\vec{k}'-\vec{q},s'} a_{\vec{k}',s'} a_{\vec{k},s}$

    $$\tilde{V}(\vec{q}) = e^2 \int d^3z\, e^{-i\vec{q}\cdot\vec{z}}\, \frac{e^{-\mu|\vec{z}|}}{|\vec{z}|} = \frac{4\pi\, e^2}{\mu^2 + \vec{q}^{\,2}}$$

- $\vec{q} = \vec{0}$-Beitrag zu $\hat{V}_{\text{el}}$:

$$\hat{V}_{\text{el},0} \equiv \frac{1}{2V} \sum_{\vec{k},\vec{k}'} \sum_{s,s'} \frac{4\pi\, e^2}{\mu^2}\; a^\dagger_{\vec{k},s} a^\dagger_{\vec{k}',s'} a_{\vec{k}',s'} a_{\vec{k},s}$$

Beitrag der Elektronen

- $H_{el} = \hat{T}_{el} + \hat{V}_{el}$
  - $\hat{T}_{el} = \sum_{\alpha=1}^{N} \frac{\vec{p}_\alpha^{\,2}}{2m} = \sum_{\vec{k},s} \frac{\hbar^2 \vec{k}^{\,2}}{2m} a^\dagger_{\vec{k},s} a_{\vec{k},s}$
  - $\hat{V}_{el} = \frac{1}{2} e^2 \sum_{\alpha,\beta} \frac{e^{-\mu|\vec{x}_\alpha - \vec{x}_\beta|}}{|\vec{x}_\alpha - \vec{x}_\beta|} = \frac{1}{2V} \sum_{\vec{k},\vec{k}',\vec{q}} \sum_{s,s'} \tilde{V}(\vec{q})\, a^\dagger_{\vec{k}+\vec{q},s} a^\dagger_{\vec{k}'-\vec{q},s'} a_{\vec{k}',s'} a_{\vec{k},s}$

    $\tilde{V}(\vec{q}) = e^2 \int d^3z\, e^{-i\vec{q}\cdot\vec{z}} \frac{e^{-\mu|\vec{z}|}}{|\vec{z}|} = \frac{4\pi e^2}{\mu^2 + \vec{q}^{\,2}}$

- $\vec{q} = \vec{0}$-Beitrag zu $\hat{V}_{el}$:

$$\hat{V}_{el,0} \equiv \frac{1}{2V} \sum_{\vec{k},\vec{k}'} \sum_{s,s'} \frac{4\pi e^2}{\mu^2}\, a^\dagger_{\vec{k},s} a^\dagger_{\vec{k}',s'} a_{\vec{k}',s'} a_{\vec{k},s}$$

$$= \frac{1}{2V} \frac{4\pi e^2}{\mu^2} \sum_{\vec{k},\vec{k}'} \sum_{s,s'} \left(a^\dagger_{\vec{k},s} a_{\vec{k},s} a^\dagger_{\vec{k}',s'} a_{\vec{k}',s'} - \delta_{\vec{k},\vec{k}'} \delta_{s,s'} a^\dagger_{\vec{k},s} a_{\vec{k},s} \right)$$

Beitrag der Elektronen

TECHNISCHE UNIVERSITÄT DARMSTADT

- $H_{\text{el}} = \hat{T}_{\text{el}} + \hat{V}_{\text{el}}$
  - $\hat{T}_{\text{el}} = \sum_{\alpha=1}^{N} \frac{\vec{p}_\alpha^{\,2}}{2m} = \sum_{\vec{k},s} \frac{\hbar^2 \vec{k}^{\,2}}{2m} a^\dagger_{\vec{k},s} a_{\vec{k},s}$
  - $\hat{V}_{\text{el}} = \frac{1}{2} e^2 \sum_{\alpha,\beta} \frac{e^{-\mu|\vec{x}_\alpha - \vec{x}_\beta|}}{|\vec{x}_\alpha - \vec{x}_\beta|} = \frac{1}{2V} \sum_{\vec{k},\vec{k}',\vec{q}} \sum_{s,s'} \tilde{V}(\vec{q})\, a^\dagger_{\vec{k}+\vec{q},s} a^\dagger_{\vec{k}'-\vec{q},s'} a_{\vec{k}',s'} a_{\vec{k},s}$

    $\tilde{V}(\vec{q}) = e^2 \int d^3z\, e^{-i\vec{q}\cdot\vec{z}}\, \frac{e^{-\mu|\vec{z}|}}{|\vec{z}|} = \frac{4\pi e^2}{\mu^2 + \vec{q}^{\,2}}$

- $\vec{q} = \vec{0}$-Beitrag zu $\hat{V}_{\text{el}}$:

$$\hat{V}_{\text{el},0} \equiv \frac{1}{2V} \sum_{\vec{k},\vec{k}'} \sum_{s,s'} \frac{4\pi e^2}{\mu^2}\; a^\dagger_{\vec{k},s} a^\dagger_{\vec{k}',s'} a_{\vec{k}',s'} a_{\vec{k},s}$$

$$= \frac{1}{2V} \frac{4\pi e^2}{\mu^2} \sum_{\vec{k},\vec{k}'} \sum_{s,s'} \left(a^\dagger_{\vec{k},s} a_{\vec{k},s} a^\dagger_{\vec{k}',s'} a_{\vec{k}',s'} - \delta_{\vec{k},\vec{k}'} \delta_{s,s'} a^\dagger_{\vec{k},s} a_{\vec{k},s} \right)$$

$$= \frac{1}{2V} \frac{4\pi e^2}{\mu^2} \left(\hat{N}^2 - \hat{N} \right)$$

$$\Rightarrow \quad V_{\text{el},0} \equiv \langle \phi | \hat{V}_{\text{el},0} | \phi \rangle = \frac{1}{2V} \, \frac{4\pi \, e^2}{\mu^2} \left(N^2 - N \right)$$

für Zustände $|\phi\rangle$ mit wohldefinierter Teilchenzahl N, $\quad \hat{N}|\phi\rangle = N|\phi\rangle$

$$\Rightarrow \quad V_{\text{el},0} \equiv \langle\phi|\hat{V}_{\text{el},0}|\phi\rangle = \frac{1}{2V}\,\frac{4\pi\,e^2}{\mu^2}\left(N^2 - N\right)$$

für Zustände $|\phi\rangle$ mit wohldefinierter Teilchenzahl N, $\quad \hat{N}|\phi\rangle = N|\phi\rangle$

- Addiere Hintergrund-Beiträge:

$$E_{\text{H}} + E_{\text{el}-\text{H}} + V_{\text{el},0} = e^2\,\frac{N^2}{V}\,\frac{4\pi}{\mu^2}\left(\frac{1}{2} - 1 + \frac{1}{2} - \frac{1}{2N}\right) = -e^2 n\,\frac{2\pi}{\mu^2}$$

$$\Rightarrow \quad V_{\mathrm{el},0} \equiv \langle\phi|\hat{V}_{\mathrm{el},0}|\phi\rangle = \frac{1}{2V}\,\frac{4\pi\,e^2}{\mu^2}\left(N^2 - N\right)$$

für Zustände $|\phi\rangle$ mit wohldefinierter Teilchenzahl N, $\quad \hat{N}|\phi\rangle = N|\phi\rangle$

- Addiere Hintergrund-Beiträge:

$$E_{\mathrm{H}} + E_{\mathrm{el-H}} + V_{\mathrm{el},0} = e^2\,\frac{N^2}{V}\,\frac{4\pi}{\mu^2}\left(\frac{1}{2} - 1 + \frac{1}{2} - \frac{1}{2N}\right) = -e^2 n\,\frac{2\pi}{\mu^2}$$

➞ Energie pro Teilchen: $\quad \frac{1}{N}(E_{\mathrm{H}} + E_{\mathrm{el-H}} + V_{\mathrm{el},0}) = -e^2\,\frac{2\pi}{V\mu^2} \xrightarrow{V\to\infty} 0$

Energiedichte: $\quad \frac{1}{V}(E_{\mathrm{H}} + E_{\mathrm{el-H}} + V_{\mathrm{el},0}) = -e^2 n\,\frac{2\pi}{V\mu^2} \xrightarrow{V\to\infty} 0$

$\Rightarrow$ $V_{\mathrm{el},0} \equiv \langle\phi|\hat{V}_{\mathrm{el},0}|\phi\rangle = \frac{1}{2V}\,\frac{4\pi\, e^2}{\mu^2}\left(N^2 - N\right)$

für Zustände $|\phi\rangle$ mit wohldefinierter Teilchenzahl N, $\hat{N}|\phi\rangle = N|\phi\rangle$

- Addiere Hintergrund-Beiträge:

$$E_{\mathrm{H}} + E_{\mathrm{el-H}} + V_{\mathrm{el},0} = e^2\,\frac{N^2}{V}\,\frac{4\pi}{\mu^2}\left(\frac{1}{2} - 1 + \frac{1}{2} - \frac{1}{2N}\right) = -e^2 n\,\frac{2\pi}{\mu^2}$$

➞ Energie pro Teilchen: $\frac{1}{N}(E_{\mathrm{H}} + E_{\mathrm{el-H}} + V_{\mathrm{el},0}) = -e^2\,\frac{2\pi}{V\mu^2} \xrightarrow{V\to\infty} 0$

Energiedichte: $\frac{1}{V}(E_{\mathrm{H}} + E_{\mathrm{el-H}} + V_{\mathrm{el},0}) = -e^2 n\,\frac{2\pi}{V\mu^2} \xrightarrow{V\to\infty} 0$

(Dazu darf man den Limes $\mu \to 0$ erst nach dem thermodynamischen Limes $V \to \infty$ bilden, wie wir es auch bei der Auswertung der Integrale gemacht haben.)

- Zwischenbilanz:

  Die Hintergrundterme heben sich im thermodynamischen Limes gegen den $\vec{q} = \vec{0}$-Anteil im Elektron-Potenzial weg.

- Zwischenbilanz:

  Die Hintergrundterme heben sich im thermodynamischen Limes gegen den $\vec{q} = \vec{0}$-Anteil im Elektron-Potenzial weg.

→ Betrachte im Folgenden nur die übrigen Terme (dabei kann auch $\mu = 0$ gesetzt werden):

$$H = \hat{T}_{\text{el}} + \hat{V}'_{\text{el}}$$

$$= \sum_{\vec{k},s} \frac{\hbar^2 \vec{k}^{\,2}}{2m} a^\dagger_{\vec{k},s} a_{\vec{k},s} + \frac{1}{2V} \sum_{\substack{\vec{k},\vec{k}' \\ \vec{q} \neq 0}} \sum_{s,s'} \frac{4\pi e^2}{\vec{q}^{\,2}} \; a^\dagger_{\vec{k}+\vec{q},s} a^\dagger_{\vec{k}'-\vec{q},s'} a_{\vec{k}',s'} a_{\vec{k},s}$$

- Zwischenbilanz:

  Die Hintergrundterme heben sich im thermodynamischen Limes gegen den $\vec{q} = \vec{0}$-Anteil im Elektron-Potenzial weg.

→ Betrachte im Folgenden nur die übrigen Terme (dabei kann auch $\mu = 0$ gesetzt werden):

$$H = \hat{T}_{\text{el}} + \hat{V}'_{\text{el}}$$

$$= \sum_{\vec{k},s} \frac{\hbar^2 \vec{k}^{\,2}}{2m} a^\dagger_{\vec{k},s} a_{\vec{k},s} + \frac{1}{2V} \sum_{\substack{\vec{k},\vec{k}' \\ \vec{q}\neq 0}} \sum_{s,s'} \frac{4\pi\, e^2}{\vec{q}^{\,2}}\; a^\dagger_{\vec{k}+\vec{q},s} a^\dagger_{\vec{k}'-\vec{q},s'} a_{\vec{k}',s'} a_{\vec{k},s}$$

- weiteres Ziel: störungstheoretische Auswertung von H