# XIII.2 Quantisierung des freien Elektromagnetischen Feldes

Schauen wir uns nochmal den Lagrangian an: (nur Feld)

$$L = \frac{1}{2} \int d^3r \left( \varepsilon_0 \dot{\underline{A}}^2(\underline{r}) - \mu_0^{-1} (\nabla \times \underline{A})^2 \right)$$

Vorbereitung für Legendretransformation

$$\underline{\Pi}(\underline{r}) = \frac{\delta L}{\delta \dot{\underline{A}}(\underline{r})} = \varepsilon_0 \dot{\underline{A}}(\underline{r})$$

Das ergibt den Hamiltonoperator

$$H = \int d^3r\, \underline{\Pi}(\underline{r}) \cdot \dot{\underline{A}}(\underline{r}) - L = \frac{1}{2} \int d^3\underline{r} \left( \varepsilon_0^{-1} \Pi^2(\underline{r}) + \mu_0^{-1} (\nabla \times \underline{A})^2 \right)$$

Kanonische Vertauschungsrelationen

$$[A_k(\underline{r}), \Pi_{k'}(\underline{r}')] = i\hbar \underbrace{\delta^{\perp}_{kk'}(\underline{r} - \underline{r}')}_{\text{Transversale } \delta\text{-Fkt, da weil wir nur den transversalen Anteil betrachten}}$$

$$\delta^{\perp}_{kk'}(\underline{r} - \underline{r}') = \frac{1}{(2\pi)^3} \int d^3k \left( \delta_{ij} - \frac{k_i k_j}{k^2} \right) e^{i\underline{k}(\underline{r} - \underline{r}')}$$

Sowie

$$[A_k(\underline{r}), A_{k'}(\underline{r}')]_- = 0 = [\Pi_k(\underline{r}), \Pi_{k'}(\underline{r}')]_-$$

Der Hamiltonoperator ist dann:

$$H = \frac{1}{2} \int d^3r \left( \varepsilon_0 \underline{E}^2(\underline{r}) + \mu_0^{-1} \underline{B}^2(\underline{r}) \right)$$

Nächster Schritt Einführung von Moden!
(ähnlich Phononen)

Aber zunächst brauchen wir Bewegungsgl.:

$$\dot{\underline{A}}(\underline{r}) = -\frac{i}{\hbar} [\underline{A}(\underline{r}), H]_- = \frac{1}{\varepsilon_0} \Pi(\underline{r})$$

$$\dot{\underline{\Pi}}(\underline{r}) = -\frac{i}{\hbar}[\underline{\Pi}, H]_- = \frac{1}{\mu_0}\Delta \underline{A}(\underline{r})$$

es folgt die Wellengleichung:

$$\Delta \underline{A}(\underline{r}) - \frac{1}{c^2}\ddot{\underline{A}}(\underline{r}) = 0$$

Es folgt der übliche Ansatz der Modenentwicklung für Vektorpotential

$$\underline{A}(\underline{r},t) = \frac{1}{\sqrt{\varepsilon_0}}\sum_\lambda \underset{\substack{\uparrow \\ \text{Operator}}}{q_\lambda} \, \underline{A}_\lambda(\underline{r})$$

wobei die Moden über

$$\Delta \underline{A}_\lambda(\underline{r}) + \frac{\omega_\lambda^2}{c^2}\underline{A}_\lambda(\underline{r}) = 0 \quad \text{und} \quad \nabla\cdot\underline{A}_\lambda = 0$$

bestimmt wurden.

Da $\Delta$ hermitisch ist kann die Orthonormierung

$$\int d^3r \, A_\lambda^*(\underline{r}) A_{\lambda'}(\underline{r}) = \delta_{\lambda\lambda'} \quad \text{gefordert.}$$

Sie erfüllen auch die transversale Vollständigkeitsrelation:

$$\sum_\lambda \underline{A}_\lambda(\underline{r}) \underset{\substack{\uparrow \\ \text{Tensorprodukt}}}{\otimes} \underline{A}_\lambda^*(\underline{r}') = \delta^\perp(\underline{r}-\underline{r}')$$

Die Koordinaten $q_\lambda(t)$ der Moden erfüllt die

$$\ddot{q}_\lambda + \omega_\lambda^2 q_\lambda = 0 \quad (\text{folgt aus dem Ansatz!})$$

D.h. für Vektorpotential

$$\underline{A}(\underline{r}) = \frac{1}{\sqrt{\varepsilon_0}}\sum_\lambda \underline{A}_\lambda(\underline{r})\, q_\lambda$$

Man kann zeigen dass der kanonische Impuls auch eine Wellengleichung erfüllen muss

$$\underline{\Pi}(\underline{r}) = \sqrt{\varepsilon_0} \sum_\lambda \underline{A}_\lambda^*(\underline{r})\, p_\lambda$$

(Modefunktion darf auch komplex sein, denn dies ist oft praktisch)

Aus den Vertauschungsrel. für $\underline{A}$ und $\underline{P}$ folgt:

$$[q_\lambda, p_{\lambda'}]_- = i\hbar\, \delta_{\lambda\lambda'}$$

$$[q_\lambda, q_{\lambda'}]_- = 0 = [p_\lambda, p_{\lambda'}]_-$$ (wieder Basiswechsel zw. Orts- und Energieraum)

Nach einer längeren Rechnung, kann der Hamiltonoperator mit Hilfe von $q_\lambda$ und $p_\lambda$ ausgedrückt werden.

$$H = \frac{1}{2} \sum_\lambda \left( p_\lambda p_\lambda^+ + \omega_\lambda^2 q_\lambda q_\lambda^+ \right)$$

Typische Form von komplexen ungekoppelten harmonischen Oszillatoren mit der Energie $\hbar\omega_\lambda$ der Photonen zur Mode $\lambda$.

Nächster Schritt Einführung von Erzeuger und Vernichter

$$q_\lambda = \sqrt{\frac{\hbar}{2\omega_\lambda}} \left( c_\lambda + \sum_{\lambda'} \underbrace{\left[\int d^3r\, A_\lambda(\underline{r})\, A_{\lambda'}(\underline{r})\right]^*}_{\text{Das ist } \delta_{\lambda\lambda'} \text{ für reelle Mod}} c_{\lambda'}^+ \right)$$

$$p_\lambda = i\sqrt{\frac{\hbar\omega_\lambda}{2}} \left( c_\lambda^+ - \sum_{\lambda'} \left[\int d^3r\, \underline{A}_\lambda(\underline{r})\, \underline{A}_{\lambda'}(\underline{r})\right] c_{\lambda'} \right)$$

Man kann zeigen, dass $\underline{A}$ und $\underline{\Pi}$ sich mit Hilfe der Erzeuger und Vernichter darstellen läßt:

$$\underline{A}(\underline{r}) = \sum_\lambda \underline{A}_\lambda(\underline{r})\, c_\lambda + h.c.$$

$$\underline{\Pi}(\underline{r}) = -\varepsilon_0 \sum_\lambda i\omega_\lambda\, \underline{A}_\lambda(\underline{r})\, c_\lambda + h.c.$$

wobei

$$c_\lambda = \frac{1}{\hbar} \int d^3r\, \underline{A}_\lambda^*(\underline{r}) \left[\varepsilon_0 \omega_\lambda \underline{A}(\underline{r}) + i\underline{\Pi}(\underline{r})\right]$$

$$c_\lambda^+ = \frac{1}{\hbar} \int d^3r\, \underline{A}_\lambda(\underline{r}) \left[\varepsilon_0 \omega_\lambda \underline{A}(\underline{r}) - i\underline{\Pi}(\underline{r})\right]$$

mit den Vertauschungsrelationen

$$[c_\lambda, c_{\lambda'}^+] = \delta_{\lambda\lambda'}$$

$$[c_\lambda, c_{\lambda'}] = 0 = [c_\lambda^+, c_{\lambda'}^+]_-$$

ergibt sich der Hamiltonoperator

$$H = \frac{1}{2} \sum_\lambda \hbar\omega_\lambda (c_\lambda^+ c_\lambda + c_\lambda c_\lambda^+)$$

$$= \sum_\lambda \hbar\omega_\lambda (c_\lambda^+ c_\lambda + \tfrac{1}{2})$$

Fall der ebenen Wellen:

Randbedingungen:

$$\underline{A}_\lambda(\underline{r}) = \underline{A}_\lambda(\underline{r} + \underline{L}) \qquad \underline{L} = (n_1 L, n_2 L, n_3 L)$$

Wir sehen sofort, dass die Wellengleichung mit ebenen Wellen gelöst wird.

Damit haben wir die Entwicklung:

$$\underline{A}(\underline{r}) = \sum_{l\sigma} \sqrt{\frac{\hbar}{2\varepsilon_0 c k_l V}}\, \underline{e}_{l\sigma}\, e^{i\underline{k}_l \cdot \underline{r}}\, c_{l,\sigma} + h.c.$$

$$\underline{\Pi}(\underline{r}) = -i \sum_{l\sigma} \sqrt{\frac{\hbar \varepsilon_0 c |k_l|}{2V}}\, \underline{e}_{l\sigma}\, e^{i\underline{k}_l \cdot \underline{r}}\, c_{l,\sigma} + h.c.$$

Bemerkung: Die Photonen können auch für anderen Spektrum quantisiert werden.

Ferner kann auch ein räumlich inhomogenes Medium betrachtet werden.

Das ist z.B. wichtig für Resonatoren und Kavitäten oder Nanoplasmonik. (Dort wird meist nur eine Mode verwendet)

Insbesondere bei offenen Systemen oder dispersiven Medien sind noch viele Fragen offen bzgl. der Quantisierung.

## XIV.3 Elektron – Photon Wechselwirkung

Nächster Schritt Kopplung zwischen Materie und Photonen. Hier vorzugsweise für Halbleiter.

Hamiltonoperator mit Elektron-Photon WW:

$$H = \sum_i \frac{(\underline{p}_i - e\underline{A}(\underline{r}_i))^2}{2m_i} + \phi(\underline{r}_i) \underset{\nabla\cdot\underline{A}(\underline{r}_i)=0}{=} \sum_i \left(\frac{p_i^2}{2m_i} - e\frac{\underline{A}(\underline{r}_i)\cdot\underline{p}_i}{m_i} + \frac{e^2\underline{A}^2(\underline{r})}{2m_i}\right) + \phi(\underline{r})$$

$$\Rightarrow H_{A\cdot p} = \sum_i -e\frac{\underline{A}(\underline{r}_i)\cdot\underline{p}_i}{m_i}$$

Den $A^2$-Term lassen wir weg, in vielen Systemen ist dieser zu vernachlässigen!
Aber Achtung z.B. in zeitlicher Störungstheorie kann er wichtig sein!

Übergang in 2. Quantisierung (Elektronen)

$$H_{A\cdot p} = \int d^3r\, \psi^\dagger(\underline{r})\left(-\frac{e\underline{A}(\underline{r})\cdot\underline{p}}{m_i}\right)\psi(\underline{r})$$

Übergang

$$\psi(\underline{r}) = \sum_{\lambda k} \frac{e^{i\underline{k}\cdot\underline{r}}}{\sqrt{V}} u_{k\lambda}(\underline{r})\, a_{\lambda k}$$

und das Lichtfeld

$$\underline{A}(\underline{r}) = \sum_{k\sigma} \sqrt{\frac{\hbar}{2\varepsilon_0\omega_k V}}\, \underline{e}_{k\sigma}\, e^{i\underline{k}\cdot\underline{r}}\, c_{\underline{k}\sigma} + h.c.$$

$\ldots \; 2\varepsilon_0 c k_q V$

Wir setzen die Definition ein, dann erhalten wir:

$$H_{A\cdot p} = \sum_{\substack{\lambda_1\lambda_2 \\ k_1 k_2}} \underbrace{\sum_{k\sigma} \int d^3r \frac{e^{-ik_1\cdot r}}{\sqrt{V}} u^*_{k_1\lambda_1}(r) \sqrt{\frac{\hbar}{2\varepsilon_0 ckV}} \, e_{k\sigma} e^{ik\cdot r} \cdot \frac{p}{m_0} \frac{e^{ik_2\cdot r}}{\sqrt{V}} \ldots u_{k_2\lambda_2}(r)}_{\otimes} \; a^\dagger_{k_1\lambda_1} a_{k_2\lambda_2} c_{k\sigma}$$

$$+ \underbrace{\qquad}_{\text{analog}} \; // \; \underbrace{\qquad}$$

Werten wir das Matrixelement $\otimes$ aus:

Zur Erinnerung aus der Übungsaufgabe für den Strom wissen wir:

$$\text{\#} \quad \frac{1}{V_{EZ}} \int_{EZ} d^3r \, u^*_{\lambda_1 k}(r) \frac{p}{m_0} u_{\lambda_2 k}(r) = \begin{cases} -\frac{\hbar k}{m_0} + \nabla_k \frac{\varepsilon_{\lambda k}}{\hbar} & \lambda_1 = \lambda_2 \\ i(\omega_{\lambda_1} - \omega_{\lambda_2}) \, r_{\lambda_1\lambda_2} & \lambda_1 \neq \lambda_2 \end{cases}$$

$$r_{\lambda_1\lambda_2} = \lim_{k\to 0} \frac{1}{V_{EZ}} \int_{EZ} d^3r \, u^*_{\lambda_1 k}(r) \, r \, u_{\lambda_2 k}(r)$$

wobei $\omega_{\lambda_1 k} = \frac{\varepsilon_{\lambda k}}{\hbar}$

$$\otimes = \frac{1}{V}\sqrt{\frac{\hbar e^2}{2\varepsilon_0 ckV}} \, e_{k\sigma} \int d^3r \, e^{-ik_1\cdot r} u^*_{k_1\lambda_1}(r) e^{ik\cdot r} \frac{p}{m_0} \frac{e^{ik_2\cdot r}}{\sqrt{V}} u_{k_2\lambda_2}(r)$$

die übliche Skalenseparation:

$$= \frac{1}{V}\sqrt{\frac{\hbar e^2}{2\varepsilon_0 ckV}} \, e_{k\sigma} \sum_i \int d^3r \underbrace{e^{-ik_1\cdot(r+R_i)} e^{ik\cdot(r+R_i)} e^{ik_2\cdot(r+R_j)}}_{\text{geringe Wellenlänge}}$$

$$\underbrace{u^*_{k\lambda_1}(r)}_{\text{periodizität!}} \left(\frac{p}{m_0} + \frac{\hbar k_2}{m_0}\right) u_{k_2\lambda_2}(r)$$

$$= \frac{1}{V}\sqrt{\frac{\hbar e^2}{2\varepsilon_0 ckV}} \, e_{k\sigma} \sum_i V_{EZ} \, e^{i(-k_1+k+k_2)\cdot R_i} \cdot \underbrace{\frac{1}{V_{EZ}} \int d^3r \, u^*_{k_1\lambda_1}(r) \left(\frac{p}{m_0} + \frac{\hbar k}{m_0}\right) u_{k_2\lambda_2}(r)}$$

$$= \frac{1}{V}\sqrt{\frac{\hbar e^2}{2\varepsilon_0 ckV}} \, e_{k\sigma} \cdot \underbrace{\int d^3R \, e^{i(-k_1+k+k_2)R}}_{\propto \, \delta_{k_2-k_1,\, k\approx 0}} \Big( \underbrace{\delta_{\lambda_1\lambda_2} \nabla_{k_1} \frac{\varepsilon_{\lambda k_1}}{\hbar}}_{\text{intraband}}$$

prozesse in einem Band

$$+\underbrace{(1-\delta_{\lambda_1,\lambda_2})\, i(\omega_{\lambda_1}-\omega_{\lambda_2})\, \underline{v}_{\lambda_1\lambda_2}}_{\text{interband prozesse}}$$

Typischer weise Band–Band übergänge

Die optischen Übergänge erfolgen mit der Regel zwischen Zuständen mit dem gleichen $\underline{k}$-Wert.

Bei größer ausgedehnten System (Größenordnung Wellenlänge!) muss $\underline{k}$ in der Auswahlregel berücksichtigt werden!

(z.B. Plasmaoszillation ist das wichtig oder Polaritonen, dann kann man nicht $\underline{k}_1 \approx \underline{k}_2$ annehmen!)

Auswahlregeln ergeben sich aus $e\,\underline{v}_{\lambda_1\lambda_2} \cdot \underline{\varepsilon}_{k\sigma}$

Skalarprodukt zwischen Dipolmoment und Polarisation des Lichts.

Hamiltonoperator der quantisierten Elektron-Licht Wechselwirkung

$$H_{A\cdot p} = \sum_{\substack{\lambda_1\lambda_2\\ k\bar{k}\\ \sigma}} \Big( M^{k}_{\substack{\bar{k}\sigma\\ \lambda_1\lambda_2}}\; a^+_{\lambda_1 k} a_{\lambda_2 k}\, c_{\bar{k}\sigma} + M^{k}_{\substack{-\bar{k}\sigma\\ \lambda_1\lambda_2}}\; a^+_{\lambda_1 k} a_{\lambda_2 k}\, c^+_{\bar{k}\sigma} \Big)$$

Für ein Zweibandsystem ergibt sich: (ohne interband Prozesse)

$$H_{A\cdot p} = \sum_{\substack{k\bar{k}\\ \sigma}} \Big( M^{k}_{\substack{\bar{k}\sigma\\ vc}}\; \cancel{a^+_{vk} a_{ck}}\, c_{\bar{k}\sigma} + M^{k}_{\substack{-\bar{k}\sigma\\ vc}}\; a^+_{vk} a_{ck}\, c^+_{\bar{k}\sigma} + M^{k}_{\substack{\bar{k}\sigma\\ cv}}\; a^+_{ck} a_{vk}\, c_{\bar{k}\sigma} + \cancel{M^{k}_{\substack{-\bar{k}\sigma\\ cv}}\; a^+_{ck} a_{vk}}\, c^+_{\bar{k}\sigma} \Big)$$

RWA

Bemerkungen:

1.) Form der Elektron–Phonon Wechselwirkung sehr ähnlich.
Nur das hier Bandübergänge sehr wichtig, während bei der Elektron–Phonon Wechselwirkung vorwiegend die Interbanddynamik wichtig ist!

2.) Bei schwacher Kopplung M (gegenüber Übergangsenergie), kann eine RWA durchgeführt werden.

z.B.

$$\frac{d}{dt} a^+_{vk} a_{ck} c_{\bar{k}\sigma} = i(\varepsilon_{vk} - \varepsilon_{ck} - \omega_{\bar{k}\sigma})\, a^+_{vk} a_{ck} c_{\bar{k}\sigma} + \ldots$$

inhomogene Terme

$$\Rightarrow \quad a^+_{v} a_{ck} c_{\bar{k}\sigma} = \ldots + \underbrace{\int M e^{i(\varepsilon_{vk} - \varepsilon_{ck} - \omega_{\bar{k}\sigma})(t-\bar{t})}}_{\text{Energieerhaltung}}$$

inhomogene Terme

mit Gegenseite

$$\frac{d}{dt} a^+_{vk} a_{ck} c^+_{k\sigma} = i(\underbrace{\varepsilon_{vk} - \varepsilon_{ck} + \omega_{\bar{k}\sigma}}_{\substack{\text{nahe Null} \\ \text{Resonant}}})\, a^+_{vk} a_{ck} c^+_{k\sigma} + \ldots$$

$$\Rightarrow \quad H_{A\cdot p} = \sum_{\substack{k\bar{k} \\ \sigma}} \left( M^{k}_{\substack{-\bar{k}\sigma \\ vc}} a^+_{vk} a_{ck} c^+_{\bar{k}\sigma} + M^{k\,k\sigma}_{cv} a^+_{ck} a_{vk} c_{\bar{k}\sigma} \right)$$

in RWA Näherung!