

## XIII.2 Quantisierung des freien Elektromagnetischen Feldes

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

$$L = \frac{1}{2} \int d^3r (\epsilon_0 \dot{\underline{A}}(\underline{r})^2 - \mu_0^{-1} (\nabla \times \underline{A})^2)$$

Vorbereitung für Legendetransformation

$$\underline{\Pi}(\underline{r}) = \frac{\delta L}{\delta \dot{\underline{A}}(\underline{r})} = \epsilon_0 \dot{\underline{A}}(\underline{r})$$

Das ergibt den Hamiltonoperator

$$H = \int d^3r \underline{\Pi}(\underline{r}) \cdot \dot{\underline{A}}(\underline{r}) - L = \frac{1}{2} \int d^3r (\epsilon_0^{-1} \underline{\Pi}^2(\underline{r}) + \mu_0^2 (\nabla \times \underline{A})^2)$$

kanonische Vertauskelsrelation

$$[A_{k_i}(\underline{r}), \Pi_{k'_i}(\underline{r}')] = i\hbar \underbrace{\delta_{kk'}^{\perp}}_{\text{Transversale } \delta\text{-Fkt.}}$$

da weil wir nur den transversalen Anteil betrachten

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

Somit

$$[A_{k_i}(\underline{r}), A_{k'_i}(\underline{r}')] = 0 = [\Pi_{k_i}(\underline{r}), \Pi_{k'_i}(\underline{r}')] = 0$$

Der Hamiltonoperator ist dann:

$$H = \frac{1}{2} \int d^3r (\epsilon_0 \underline{E}^2(\underline{r}) + \mu_0^{-1} \underline{B}^2(\underline{r}))$$

Nächster Schritt Einführung von Moden!  
(ähnliche Phänom.)

Aber zunächst bräuh wir Bewegungsgl.:

$$\dot{\underline{A}}(\underline{r}) = -\frac{i}{\hbar} [\underline{A}(\underline{r}), H] = \frac{1}{\epsilon_0} \underline{\Pi}(\underline{r})$$

$$\ddot{\underline{H}}(\underline{r}) = -\frac{\hat{r}}{r} [\underline{H}, H]_- = \frac{1}{\mu_0} \Delta \underline{A}(\underline{r})$$

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

$$\underline{A}(\underline{r}, t) = \frac{1}{\sqrt{\epsilon_0}} \sum_{\lambda} q_{\lambda} \underline{A}_{\lambda}(\underline{r})$$

wobei die Moden  $q_{\lambda}$  Operatoren sind

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

bestimmt werden.

Da  $\Delta$  hermitisch ist kann die Orthogonalnormierung

$$\int d^3r \underline{A}_{\lambda}^x(\underline{r}) \underline{A}_{\lambda'}^x(\underline{r}) = \delta_{\lambda\lambda'}$$

gefordert.

Sie erfüllen auch die transverse Vollständigkeitsrelation:

$$\sum_{\lambda} \underline{A}_{\lambda}(\underline{r}) \otimes \underline{A}_{\lambda}^x(\underline{r}') = \delta^+(\underline{r}-\underline{r}')$$

↑  
Tensorprodukt

Die Koordinate  $q_{\lambda}(t)$  der Mode erfüllt die

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

D. h. für Vektorpotential

$$\underline{A}(\underline{r}) = \frac{1}{\sqrt{\epsilon_0}} \sum_{\lambda} \underline{A}_{\lambda}(\underline{r}) q_{\lambda}$$

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

$$\Pi(\underline{k}) = \sqrt{\epsilon_0} \sum_{\lambda} \underline{A}_{\lambda}^{\times}(\underline{k}) p_{\lambda}$$

(Modelfunktion darf auch komplex sein, das ist oft praktisch)

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

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

$$[q_{\lambda}, q_{\lambda'}]_{-} = 0 = [p_{\lambda}, p_{\lambda'}]_{-} \quad (\text{wieder Bezugswert zur Orts- und Energiem.})$$

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

$$H = \frac{1}{2} \sum_{\lambda} [p_{\lambda} p_{\lambda}^{\dagger} + \omega_{\lambda}^2 q_{\lambda} q_{\lambda}^{\dagger}]$$

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

Nächster Schritt Einführung von Erzeugen und Vernichten

$$q_{\lambda} = \sqrt{\frac{\hbar}{2\omega_{\lambda}}} \left\{ c_{\lambda} + \sum_{\lambda'} \underbrace{[\int d^3v \underline{A}_{\lambda}(\underline{k}) \underline{A}_{\lambda'}^{\dagger}(\underline{k})]}_{\text{Das ist } \delta_{\lambda\lambda'} \text{ für reale Mod.}} c_{\lambda'}^{\dagger} \right\}$$

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

Man kann zeigen, dass  $\underline{A}$  und  $\underline{\Pi}$  sich mit Hilfe der Erzeugen und Vernichten darstellen lassen:

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

$$\underline{\Pi}(\underline{k}) = -\epsilon_0 \sum_{\lambda} i\omega_{\lambda} \underline{A}_{\lambda}(\underline{k}) c_{\lambda} + h.c.$$

wobei

$$c_{\lambda} = \frac{1}{\hbar} \int d^3v \underline{A}_{\lambda}^{\times}(\underline{k}) [\epsilon_0 \omega_{\lambda} \underline{A}(\underline{k}) + i \underline{\Pi}(\underline{k})]$$

$$c_{\lambda}^{\dagger} = \frac{1}{\hbar} \int d^3v \underline{A}_{\lambda}(\underline{k}) [\epsilon_0 \omega_{\lambda} \underline{A}(\underline{k}) - i \underline{\Pi}(\underline{k})]$$

mit den Vertikaloperatoren

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

$$[c_\lambda, c_{\lambda'}] = 0 = [c_\lambda^\dagger, c_{\lambda'}^\dagger]$$

ergibt sich der Hamiltonoperator

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

Fall der ebenen Wellen:

Randbedingungen:

$$\underline{A}_{\lambda}(\underline{r}) = \underline{A}_{\lambda}(\underline{r} + \underline{L}) \quad \underline{L} = (n_1 L_1, n_2 L_2, n_3 L_3)$$

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

Damit haben wir die Entwicklung:

$$\underline{A}(\underline{r}) = \sum_{\underline{e}, \sigma} \sqrt{\frac{\hbar}{2 \epsilon_0 c k V}} \underline{e}_{\underline{e}, \sigma} e^{i \underline{k}_{\underline{e}} \cdot \underline{r}} c_{\underline{e}, \sigma} + h.c.$$

$$\underline{H}(\underline{r}) = -i \sum_{\underline{e}, \sigma} \sqrt{\frac{\hbar \epsilon_0 c k V}{2 V}} \underline{e}_{\underline{e}, \sigma} e^{i \underline{k}_{\underline{e}} \cdot \underline{r}} c_{\underline{e}, \sigma} + h.c.$$

Bemerkung: Die Photonen können auch für andere Symmetrien quantisiert werden.

Ferner kann auch ein räumlich inhomogenes Medium betrachtet werden.

Das ist z. B. wichtig für Resonatoren und Kavitäten oder Nanoplasmik. (Dort wird meist

Insbesondere bei offnem System oder <sup>in eine Mode verwendet</sup>  
 dispersion Medien sind noch viele Fragen offen  
 bzgl. der Quantisierung.

### XIV.3 Elektron-Photon Wechselwirkung

Nächster Schritt Kopplung zwischen Materie und  
 Photon. Hier vorrangig für Halbleiter.

Hamilton operat mit Elektron-Photon WW:

$$H = \sum_i \frac{(p_i - e \underline{A}(r_i))^2}{2m_i} + \phi(r_i) = \sum_i \left( \frac{p_i^2}{2m_i} - e \frac{\underline{A}(r_i) \cdot p_i}{m_i} + \frac{e^2 \underline{A}(r_i)^2}{2m_i} \right) + \phi(r_i)$$

$\nabla \cdot \underline{A}(r_i) = 0$

$$\Rightarrow H_{A.p} = \sum_i -e \frac{\underline{A}(r_i) \cdot p_i}{m_i}$$

Dann  $A^2$ -Term kann wir weglassen, in vielen Systemen  
 ist diese zu vernachlässigen!

Aber Achtung z.B. in zeitlicher Störungs theorie kann  
 er wichtig sein!

Übergang in 2. Quantisierung (Elektronen)

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

Übergang

$$\psi(r) = \sum_{k\sigma} \frac{e^{ik \cdot r}}{\sqrt{V}} u_{k\sigma}(k) a_{k\sigma}$$

und das Lichtfeld

$$\underline{A}(r) = \sum_{k\sigma} \sqrt{\frac{\hbar}{2\epsilon_0 V}} \underline{e}_{k\sigma} e^{ik \cdot r} c_{k\sigma} + h.c.$$

Wir setzen die Definition ein, dann erhalten wir:

$$H_{A-p} = \sum_{\substack{\lambda_1 \lambda_2 \\ k_1 k_2}} \sum_{k_0} \int d^3r \underbrace{\frac{e^{-i\mathbf{k}_1 \cdot \mathbf{r}}}{\sqrt{V}} u_{\mathbf{k}_1 \lambda_1}^x(\mathbf{r}) \sqrt{\frac{\hbar}{2\epsilon_0 c k_1}}}_{\text{①}} \underbrace{\frac{e^{i\mathbf{k}_2 \cdot \mathbf{r}}}{\sqrt{V}} u_{\mathbf{k}_2 \lambda_2}(\mathbf{r})}_{\text{②}} \cdot \frac{p}{m_0}$$

+ analog

Warten wir das Matrixelement ab:

Zur Erinnerung aus der Übung Aufgabe für den Streuansatz:

$$\text{③} \quad \frac{1}{V E^2} \int_{E^2} d^3r u_{\mathbf{k}_1 \lambda_1}^x(\mathbf{r}) \frac{p}{m_0} u_{\mathbf{k}_2 \lambda_2}(\mathbf{r}) = \begin{cases} -\frac{\hbar k}{m_0} + \sqrt{\frac{\hbar E k}{\epsilon_0}} \lambda_1 \lambda_2 \\ i(\omega_{\lambda_1} - \omega_{\lambda_2}) \sqrt{\frac{\hbar E k}{\epsilon_0}} \lambda_1 \lambda_2 \end{cases}$$

$$\lambda_1 \lambda_2 = \lim_{k \rightarrow 0} \frac{1}{V E^2} \int_{E^2} d^3r u_{\mathbf{k}_1 \lambda_1}^x(\mathbf{r}) \lambda_2 u_{\mathbf{k}_2 \lambda_2}(\mathbf{r})$$

wobei  $\omega_{\lambda_1 k} = \frac{E \hbar k}{\hbar}$

$$\text{④} = \frac{1}{V} \sqrt{\frac{\hbar e^2}{2 \epsilon_0 c k V}} \sum_{k_0} \int d^3r e^{-i\mathbf{k}_1 \cdot \mathbf{r}} u_{\mathbf{k}_1 \lambda_1}^x(\mathbf{r}) e^{i\mathbf{k}_2 \cdot \mathbf{r}} \frac{p}{m_0} \frac{e^{i\mathbf{k}_2 \cdot \mathbf{r}}}{\sqrt{V}} u_{\mathbf{k}_2 \lambda_2}(\mathbf{r})$$

die übliche Skalierung:

$$= \frac{1}{V} \sqrt{\frac{\hbar e^2}{2 \epsilon_0 c k V}} \sum_{k_0} \int d^3r e^{-i\mathbf{k}_1 \cdot (\mathbf{r} + \mathbf{R}_i)} e^{i\mathbf{k}_2 \cdot (\mathbf{r} + \mathbf{R}_i)} e^{i\mathbf{k}_2 \cdot (\mathbf{r} + \mathbf{R}_j)}$$

springe Wellenlänge

$$\underbrace{u_{\mathbf{k}_1 \lambda_1}^x(\mathbf{r}) \left( \frac{p}{m_0} + \frac{\hbar k_2}{m_0} \right) u_{\mathbf{k}_2 \lambda_2}(\mathbf{r})}_{\text{periodizität!}}$$

$$= \frac{1}{V} \sqrt{\frac{\hbar e^2}{2 \epsilon_0 c k V}} \sum_{k_0} \sum_i \int_{V_{E^2}} d^3r e^{i(-k_1 + k_2) \cdot \mathbf{R}_i} \frac{1}{V_{E^2}} \int d^3r u_{\mathbf{k}_1 \lambda_1}^x(\mathbf{r}) \left( \frac{p}{m_0} + \frac{\hbar k_2}{m_0} \right) u_{\mathbf{k}_2 \lambda_2}(\mathbf{r})$$

$$= \frac{1}{V} \sqrt{\frac{\hbar e^2}{2 \epsilon_0 c k V}} \sum_{k_0} \int d^3R e^{i(-k_1 + k_2) \cdot \mathbf{R}} \left( \int_{\lambda_1 \lambda_2} \sqrt{\frac{\hbar E k_1}{\epsilon_0}} \right)$$

$\propto \delta_{\mathbf{k}_2 - \mathbf{k}_1, \mathbf{k} \approx 0}$       intra band prozesse in der Band

$$+ (1 - \delta_{\lambda_1, \lambda_2}) i (\omega_{\lambda_1} - \omega_{\lambda_2}) \chi_{\lambda_1, \lambda_2}$$

interband process  
Typischer zwei Band-Band  
Übergang

Die optische Übergang erfolgen mit der  
Resonanz zwischen Zuständen mit dem gleich  $k$ -Wert.

Bei größer ausgedehnte System (Größenordnung Wellenlänge!)  
muss  $k$  in der Auswahlregel berücksichtigt werden!  
(z.B. Plasmaoszillation ist das wichtig oder  
Polaritonen, dann kann man nicht  $k_1 \approx k_2$   
annehmen!)

Auswahlregel ergibt sich aus  $e \cdot \chi_{\lambda_1, \lambda_2} \cdot \epsilon_{\lambda_1, \lambda_2}$   
Skalarprodukt zwischen Dipolmoment und Polarisation des Lichts.  
Hamiltonoperator der quantisierten Elektron-Licht Wechselwirkung

$$H_{A-p} = \sum_{\substack{k \in \text{BZ} \\ \sigma}} \left( M_{\lambda_1 \sigma}^k a_{\lambda_1 k}^\dagger a_{\lambda_2 k} c_{\lambda_1 \sigma} + M_{\lambda_2 \sigma}^k a_{\lambda_1 k}^\dagger a_{\lambda_2 k} c_{\lambda_2 \sigma}^\dagger \right)$$

Für ein Zweibandssystem ergibt sich: (ohne interband Prozess)

$$H_{A-p} = \sum_{\substack{k \in \text{BZ} \\ \sigma}} \left( M_{\lambda_1 \sigma}^k a_{\lambda_1 k}^\dagger a_{\lambda_2 k} c_{\lambda_1 \sigma} + M_{\lambda_2 \sigma}^k a_{\lambda_1 k}^\dagger a_{\lambda_2 k} c_{\lambda_2 \sigma}^\dagger + M_{\lambda_1 \sigma}^k a_{\lambda_1 k}^\dagger a_{\lambda_2 k} c_{\lambda_1 \sigma} + M_{\lambda_2 \sigma}^k a_{\lambda_1 k}^\dagger a_{\lambda_2 k} c_{\lambda_2 \sigma}^\dagger \right)$$

**RWA**

Bemerkungen:

- 1.) Formel der Elektron-Phonon Wechselwirkung sehr ähnlich  
Nur das hier Bandübergänge sehr wichtig,  
während bei der Elektron-Phonon Wechselwirkung  
vorzugsweise die Interbandübergänge wichtig ist!
- 2.) Bei schwach Kopplung  $M$  (geringer Übergangswahrscheinlichkeit)  
kann ein RWA durchgeführt werden.

z.B.

$$\frac{d}{dt} a_{vk}^+ a_{ck}(\omega_0) = i(\epsilon_{vk} - \epsilon_{ck} - \omega_0) a_{vk}^+ a_{ck}(\omega_0) + \dots$$

$$\Rightarrow a_{vk}^+ a_{ck}(\omega_0) = \dots + \underbrace{\int M_e^{i(\epsilon_{vk} - \epsilon_{ck} - \omega_0)t} dt}_{\text{Energieerhaltung}} \quad \begin{matrix} \text{inkompatibel} \\ \text{Terme} \\ \text{inkompatibel Terme} \end{matrix}$$

im Gegensatz

$$\frac{d}{dt} a_{vk}^+ a_{ck}(\omega_0) = i(\underbrace{\epsilon_{vk} - \epsilon_{ck} + \omega_0}_{\text{nah Null Result}}) a_{vk}^+ a_{ck}(\omega_0) + \dots$$

$$\Rightarrow H_{A.P} = \sum_{\substack{k \\ \sigma}} \left( M_{-k\sigma}^k a_{vk}^+ a_{ck}(\omega_0) + M_{k\sigma}^k a_{ck}^+ a_{vk}(\omega_0) \right)$$

im RWA Näherung!