System von (f) klassischen Oszillatoren

$$L = \frac{1}{2}\dot{q}^T \underline{\underline{T}}\,\dot{q} - \frac{1}{2} q^T \underline{\underline{V}}\, q$$ Auslenkungen

$q = \underline{\underline{A}}\, \underline{Q}$ Normalkoordinaten

Lagrangefunktion

$$\rightarrow L = \frac{1}{2}\dot{\underline{Q}}^T\dot{\underline{Q}} - \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{f}\omega_i^2 Q_i^2$$ entkoppelt

„Normalschwingungen"

Kollektive Schwingungen („Phononen")

Hamiltonfunktion:

$$H = \sum_{i=1}^{f} \dot{Q}_i \underbrace{\frac{\partial L}{\partial \dot{Q}_i}}_{P_i \text{ Kanon. Impuls}} - L \quad \rightarrow H = \sum_{i=1}^{f}\left(\frac{1}{2}P_i^2 + \frac{1}{2}\omega_i^2 Q_i^2\right)$$

$\{Q_k, P_j\} = \delta_{kj}$ fundamentale Poissonklam.

Kanonische Variablen!

Korrespondenzprinzip $Q_k \rightarrow \hat{Q}_k$, $P_j \rightarrow \hat{P}_j$

mit $[\hat{Q}_k, \hat{P}_j] = i\hbar\, \delta_{kj}$

$\rightarrow$ Hamiltonoperator: $$\boxed{\hat{H} = \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{f}\left(\hat{P}_i^2 + \omega_i^2 \hat{Q}_i^2\right)}$$

Das sind f quantenmechanische harmonische Oszillatoren, voneinander entkoppelt!

Lösungsweg bekannt!

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^{f}\underbrace{\hbar\omega_i\left(\hat{N}_i + \frac{1}{2}\right)}_{\hat{H}_i} = \sum_{i=1}^{f}\hat{H}_i$$

mit $\hat{N}_i = \hat{a}_i^+ \hat{a}_i$ mit $\hat{a}_i = \sqrt{\frac{\omega_i}{2\hbar}}\,\hat{Q}_i + \frac{i}{\sqrt{2\hbar\omega_i}}\,\hat{P}_i$ Vernichtungsoperator (Absteiger)

$$\hat{a}_i^+ = \sqrt{\frac{\omega_i}{2\hbar}}\,\hat{Q}_i - \frac{i}{\sqrt{2\hbar\omega_i}}\,\hat{P}_i$$ Erzeugungsoperator (Aufsteiger)

mit $[\hat{a}_i, \hat{a}_k^+] = \delta_{ik}$

also „bosonische" Vertauschungsrelation (s. Kap II)

Eigenzustände: $\hat{H}_i |n_i\rangle = E_i |n_i\rangle$

~~mit~~ mit $|n_i\rangle = \frac{(\hat{a}_i^+)^{n_i}}{\sqrt{n_i!}}\,|0\rangle_i$

Vakuumzustand zum Oszillator i

und $E_i = \hbar\omega_i\left(n_i + \frac{1}{2}\right)$

Interpretation:

- Der Eigenzustand $|n_i\rangle$ jedes Oszillators, der durch n-faches Anwenden von $\hat{a}_i^+$ auf $|0\rangle_i$ resultiert, heißt n-Phononen-Zustand

- Wir fassen also den Hilbertraum jedes Oszillators als (bosonischen) Fockraum auf

- Die hier vorkommenden Bosonen sind keine echten Teilchen, sondern kollektive Anregungen (Quantenteilchen, Phononen)

- Die Interpretation als System von Quantenteilchen ist konsistent mit der Tatsache dass sich die Energien E_i immer um ganzzahlige Vielfache der Eigenfrequenz ω_i erhöhen

- Gesamtsystem:

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^{f} \underbrace{\hat{H}_i}_{\text{charakterisiert durch Frequenz } \omega_i}$$

Da entkoppelt, sind die Eigenzustände von $\hat{H}$ Produktzustände

$$\hat{H}\,|n_1, \dots, n_f\rangle = E(n_1, \dots, n_f)\,|n_1, n_2, \dots, n_f\rangle$$

mit $|n_1, \dots n_f\rangle = |n_1\rangle \otimes |n_2\rangle \otimes \dots |n_f\rangle$

und $E(n_1, \dots, n_f) = \sum_{i=1}^{f} E_i = \sum_{i=1}^{f} \hbar\omega_i \left(n_i + \frac{1}{2}\right)$

- Speziell Festkörper (Phononen)

Ersetze die Summe $\sum_{i=1}^{f}$ durch die Summe über alle zulässigen Wellenvektoren $\underline{k}$ und "Zweigindex" s

$$\Rightarrow \boxed{\hat{H}_{\text{Phonon}} = \sum_{\underline{k},s} \hbar\,\omega_s(\underline{k}) \left(\overbrace{\hat{a}^+_{\underline{k},s}\,\hat{a}_{\underline{k},s}}^{\hat{N}_{\underline{k},s}} + \frac{1}{2}\right)}$$

Zum Zweigindex:

Es gibt akustische Moden ($\lim_{k\to 0} \omega(\underline{k}) = 0$) und optische Moden ($\lim_{k\to 0} \omega(\underline{k}) \neq 0$)

In 3-dim. Kristallen mit p Atomen pro Gitterzelle gibt es zu jedem $\underline{k}$ insgesamt $3P$ Moden: 3 akustische Moden und $(3p-3)$ optische Moden

IV. 2. Quantisierung des elektromagnetischen Feldes

Klassische Beschreibung des elektromagnet. Feldes

Maxwell-Gleichungen (hier in SI)

$\nabla \cdot \underline{E} = \frac{\rho(\underline{r},t)}{\varepsilon_0}$ (ρ Ladungsdichte), $\quad \nabla \times \underline{E} = -\frac{\partial}{\partial t}\underline{B}$ (Induktionsgesetz)

$\nabla \cdot \underline{B} = 0$, $\quad \nabla \times \underline{B} = \mu_0 \varepsilon_0 \frac{\partial}{\partial t}\underline{E} + \mu_0 \underline{j}(\underline{r},t)$

$\mu_0 \varepsilon_0 = \frac{1}{c^2}$ $\quad$ $\underline{j}$: Stromdichte

mit $\underline{E} = E(\underline{r},t)$, $\underline{B} = \underline{B}(\underline{r},t)$

(Wir betrachten keine makroskopische Beschreibung der Materie
→ keine Polarisations- oder Magnetisierungsfelder
→ $\underline{D} = \varepsilon_0 \underline{E}$, $\underline{H} = (\mu_0^{-1})\underline{B}$)

Umschreiben der Maxwell-Gl. als Potentialgleichungen

$$\underline{B} = \nabla \times \underline{A}$$
$$\underline{E} = -\nabla \phi - \frac{\partial}{\partial t}\underline{A}$$

mit $\underline{A}(\underline{r},t)$ Vektorpotential, $\phi(\underline{r},t)$ skalares Potential

Einsetzen:

$$\Delta \phi + \nabla \cdot \dot{\underline{A}} = -\frac{\rho(\underline{r},t)}{\varepsilon_0}$$

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

trivial, da div rot ... = 0

$$\underbrace{\nabla \times (-\nabla \phi}_{\text{Null, da rot grad ... = 0}} - \frac{\partial}{\partial t}\underline{A}) = -\frac{\partial}{\partial t}\underline{B}$$

$$\nabla \times (\nabla \times \underline{A}) = \frac{1}{c^2}(-\nabla \dot{\phi} - \ddot{\underline{A}}) + \mu_0 \underline{j}$$

Umschreiben der letzten Gl. mit $\nabla \times (\nabla \times \ldots) = \nabla(\nabla \cdot \ldots) - \Delta$

$$\nabla(\nabla \cdot \underline{A}) - \Delta \underline{A} = \frac{1}{c^2}(-\nabla \dot{\phi} - \ddot{\underline{A}}) + \mu_0 \underline{j}$$

$$\Longleftrightarrow \quad -\Delta \underline{A} + \frac{1}{c^2}\ddot{\underline{A}} + \nabla\left(\nabla\cdot\underline{A} + \frac{1}{c^2}\dot{\phi}\right) = \mu_0 \underline{j} \qquad (*)$$

außerdem $\Delta\phi + \nabla\cdot\dot{\underline{A}} = -\rho/\varepsilon_0$

skalare Funktion $\chi(\underline{r},t)$

Entkopplung durch Eichtransformation: $\left.\begin{array}{l} \underline{A} \to \underline{A} + \nabla\chi \\ \phi \to \phi - \dot{\chi} \end{array}\right\}$ läßt $\underline{E}, \underline{B}$ invariant

Lorentz-Eichung

wähle $\chi(\underline{r},t)$ so, dass gilt: $\nabla\cdot\underline{A} + \frac{1}{c^2}\dot{\phi} = 0$

aus $(*)$

$$\Rightarrow \quad -\Delta\underline{A} + \frac{1}{c^2}\ddot{\underline{A}} = \mu_0 \underline{j}$$

$$\Delta\phi - \frac{1}{c^2}\ddot{\phi} = -\frac{\rho(\underline{r},t)}{\varepsilon_0}$$

Das ist eine relativistisch kovariante Eichung

Raum- und Zeitableitungen auf gleicher Stufe

($\to$ benutzt in Kap I der Vorlesung)

Coulomb-Eichung

wähle $\chi(\underline{r},t)$ so, dass $\nabla\cdot\underline{A}(\underline{r},t) = 0$

$$\boxed{\begin{array}{c} -\Delta\underline{A} + \frac{1}{c^2}\ddot{\underline{A}} + \frac{1}{c^2}\nabla\dot{\phi} = \mu_0 \underline{j}(\underline{r},t) \\ \Delta\phi = -\frac{\rho(\underline{r},t)}{\varepsilon_0} \end{array}}$$

Wir spezialisieren jetzt (zunächst) auf den Fall $\rho = 0$, $\underline{j} = 0$

keine (mikroskop.) Ladungen, keine Ströme

$$\to \Delta\phi = 0 \qquad \Rightarrow \qquad \phi(\underline{r},t) \sim \int d\underline{r}' \frac{\rho(\underline{r}',t)}{|\underline{r}-\underline{r}'|} = 0$$

Das Potential ϕ ist immer Null !!

keine Retardierung!

$\to$ Die alleine relevante Gleichung ist:

$$\boxed{-\Delta\underline{A} + \frac{1}{c^2}\ddot{\underline{A}} = 0}$$

Lösung: Entwicklung nach "Eigenmoden"
Ansatz

Vektoren

$$(**) \quad \boxed{\underline{A}(\underline{r},t) = \sum_{\underline{k}} \left(\frac{\hbar}{2\omega_{\underline{k}}\varepsilon_0}\right)^{\frac{1}{2}} \left(a_{\underline{k}} \underline{u}_{\underline{k}}(\underline{r}) e^{-i\omega_{\underline{k}} t} + a_{\underline{k}}^* \underline{u}_{\underline{k}}^*(\underline{r}) e^{i\omega_{\underline{k}} t} \right)}$$

Variablen (Zahlen im klass. Fall)

Idee dahinter: wir interessieren uns für Vektorpotential $\underline{A}$ innerhalb eines festen Raumgebiets ("Kavität"). $\underline{A}$ soll auf dem Rand des Gebiets verschwinden.

Weitere Bemerkung zu (**)

– Damit (**) die Coulombeichung erfüllt, muss gelten (auch alleine für Real- bzw. Imaginärteil!)

$$\nabla \cdot \underline{u}_{\underline{k}}(\underline{r}) = 0 \quad , \text{ damit auch } \quad \nabla \cdot \underline{u}_{\underline{k}}^*(\underline{r}) = 0$$

häufig spricht man von "transversalen" Moden.

nehme an, dass $\underline{u}_{\underline{k}}(\underline{r}) \sim \underline{c}\, e^{i\underline{k}\cdot\underline{r}}$ (oder Überlagerung davon)
Konstant

$$\nabla \cdot \underline{u}_{\underline{k}}(\underline{r}) \sim \underline{k} \cdot \underline{u}_{\underline{k}}(\underline{r}) \overset{!}{=} 0$$

$\Rightarrow \underline{u}_{\underline{k}}$ und $\underline{k}$ müssen senkrecht aufeinander stehen!
"transversal"

– (**) sollte Entwicklung in ein vollständiges Orthonormalsystem darstellen

fordere $\displaystyle\int_G d\underline{r}\; \underline{u}_{\underline{k}}^*(\underline{r})\, \underline{u}_{\underline{k}'}(\underline{r}) = \delta_{\underline{k},\underline{k}'}$

G – interessierendes Raumgebiet (Kavität)

– Bestimmung der Frequenz $\omega_{\underline{k}}$ in (**):

Setze (**) in die Gl. $-\Delta \underline{A} + \frac{1}{c^2}\ddot{\underline{A}} = 0$

$$-\sum_{\underline{k}} \left(\frac{\hbar}{2\omega_{\underline{k}}\varepsilon_0}\right)^{\frac{1}{2}} \left(a_{\underline{k}}\, \Delta \underline{u}_{\underline{k}}(\underline{r})\, e^{-i\omega_{\underline{k}} t} + a_{\underline{k}}^*\, \Delta \underline{u}_{\underline{k}}^*(\underline{r})\, e^{i\omega_{\underline{k}} t} \right)$$

$$+\frac{1}{c^2}\sum_{\underline{k}}\left(\frac{\hbar}{2\omega_k\varepsilon_0}\right)^{\frac{1}{2}}\Big(a_{\underline{k}}\,\underline{u}_{\underline{k}}(\underline{r})\,(-i\omega_k)^2 e^{-i\omega_k t}$$
$$+\,a_{\underline{k}}^*\,\underline{u}_{\underline{k}}^*(\underline{r})\,(i\omega_k)^2 e^{i\omega_k t}\Big) \overset{!}{=} 0$$

Das soll für jedes $\underline{k}$ und unabhängig für Real- und Imaginärteil gelten!

$$\Rightarrow \boxed{\Delta\underline{u}_{\underline{k}}(\underline{r}) + \frac{\omega_k^2}{c^2}\underline{u}_{\underline{k}}(\underline{r}) = 0}$$

Frage nun:

Wie lautet der Hamiltonoperator zum elektromagnet. Feld?

Zunächst speziell für den Fall $\rho = 0$, $\underline{j} = 0$?

Hier auf Basis des klass. Ausdrucks für die Energiedichte!

(später: Herleitung über Lagrangedichte)

klass. Elektrodynamik

$$\text{Energie:}\quad E = \int d\underline{r}\;\underbrace{\varepsilon(\underline{r},t)}_{\text{Energiedichte}} = \int d\underline{r}\left(\frac{1}{2}\varepsilon_0\left(\underline{E}(\underline{r},t)\right)^2 + \frac{1}{2\mu}\left(\underline{B}(\underline{r},t)\right)^2\right)$$

$$\text{hier:}\quad \underline{E}(\underline{r},t) = -\dot{\underline{A}} \qquad (\text{da } \phi = 0 \text{ in der Coulombeichung})$$
$$\underline{B}(\underline{r},t) = \nabla\times\underline{A}$$

Benutze unseren Ansatz für $\underline{A}(\underline{r},t)$

lasse Ortsargument $(\underline{r})$ weg

$$\Rightarrow \underline{E} = -\dot{\underline{A}} = \sum_{\underline{k}}\left(\frac{\hbar}{2\omega_k\varepsilon_0}\right)^{\frac{1}{2}}\left(i\omega_k\, a_{\underline{k}}\,\underline{u}_{\underline{k}}\, e^{-i\omega_k t} - i\omega_k\, a_{\underline{k}}^*\,\underline{u}_{\underline{k}}^*\, e^{i\omega_k t}\right)$$
$$= i\sum_{\underline{k}}\left(\frac{\hbar\omega_k}{2\varepsilon_0}\right)^{\frac{1}{2}}\left(a_{\underline{k}}\,\underline{u}_{\underline{k}}\, e^{-i\omega_k t} - a_{\underline{k}}^*\,\underline{u}_{\underline{k}}^*\, e^{i\omega_k t}\right)$$

$$\underline{B} = \nabla\times\underline{A} = \sum_{\underline{k}}\left(\frac{\hbar}{2\omega_k\varepsilon_0}\right)^{\frac{1}{2}}\left(a_{\underline{k}}\left(\nabla\times\underline{u}_{\underline{k}}\right)e^{-i\omega_k t} + a_{\underline{k}}^*\left(\nabla\times\underline{u}_{\underline{k}}^*\right)e^{i\omega_k t}\right)$$