

5.4. Quantifizierung d. Normalmoden

Lagrangian: $\frac{1}{2} \sum_{\alpha} (\dot{y}_{\alpha}^2 - \omega_{\alpha}^2 y_{\alpha}^2)$ der Normalmoden gekoppelter Kernschwingungen

sind Oszillatoren mit Index α , ungekoppelt und werden quantisiert
analog dem harmonischen Oszillator aus Mechanik mit $m_{\alpha} \rightarrow 1$ (Masse)

$$y_{\alpha}(t) = \left(\frac{\hbar}{2m_{\alpha}\omega_{\alpha}}\right)^{1/2} (b_{\alpha}^{\dagger}(t) + b_{\alpha}(t))$$

$$p_{\alpha}(t) = i \left(\frac{\hbar m_{\alpha}\omega_{\alpha}}{2}\right)^{1/2} (b_{\alpha}^{\dagger}(t) - b_{\alpha}(t))$$

$\hat{b}_{\alpha}^{\dagger}$ = Anhebige und \hat{b}_{α} = Absinkende Operatoren der QM I.

Damit kann man sofort den Hamiltonian Kernschwingg. aufschreiben:

$$H_{\text{Kern-Kern}} = \sum_{\alpha} \hbar \omega_{\alpha} b_{\alpha}^{\dagger} b_{\alpha} \quad \text{im Heisenberg Bild: } b_{\alpha}^{\dagger}(t), b_{\alpha}(t)$$

gleich Ort, Impuls y_{α}, p_{α} den üblichen q_{α}, p_{α} Vertauschungsrelationen genügen

sind die b_{α} Bosonen: $[b_{\alpha}, b_{\beta}^{\dagger}] = \delta_{\alpha\beta}$, $[b_{\alpha}^{\dagger}, b_{\beta}^{\dagger}] = 0$

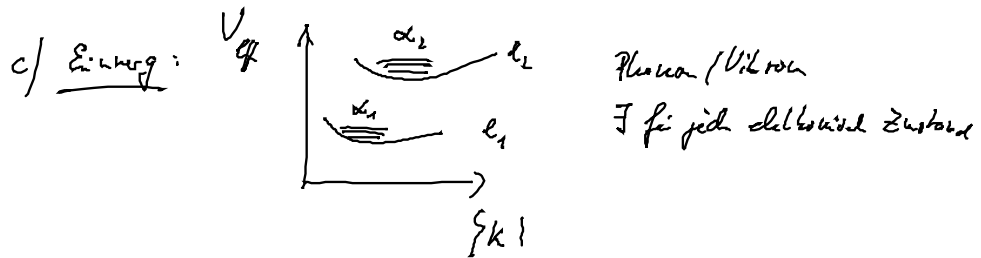
Bemerkung:

a) Quant der Normalmoden der Kernoszillationen werden
Vibronen (Moleküle) und Phononen (Festkörper, Kristalle)

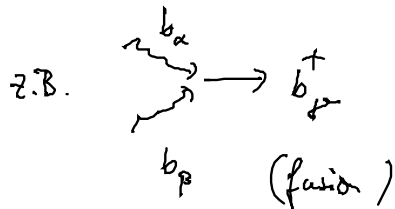
b) Auslenkung des einzelnen Kerns: $\delta q_i = \frac{1}{\sqrt{m_i \omega_i}} \sum_{\alpha} y_{\alpha}(t) A_i^{\alpha}(\omega_{\alpha})$

↑
Klein Abwägung von i -ter Komponente der k -te Kerns

$$\delta q_i(k) = \sum_{\alpha} \left(\frac{t_{\alpha}}{2\omega_{\alpha} \omega(k)} \right)^{1/2} A_i^k(\omega_{\alpha}) (b_{\alpha}^{\dagger}(t) + b_{\alpha}(t))$$



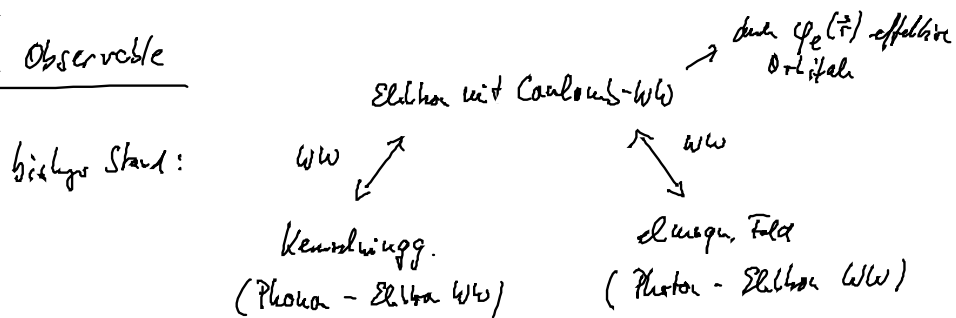
d) Phonon-Phonon-Wechselwirkung durch anharmonische Terme δq_i^3 .



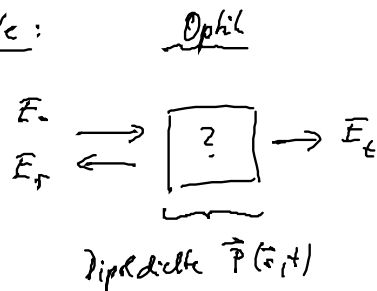
IV Wechselwirkung Quantenfelder:

Formulierung der Elektron-Phonon / Elektron-Photon Wechselwirkung

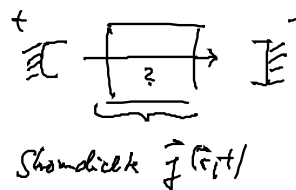
1. Observable

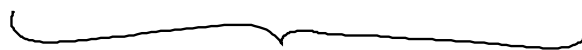


Observable:

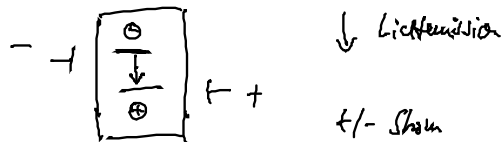


Transport





Kombination:



Observable Photonzahl $n(t) = \sum_{\lambda} \langle c_{\lambda}^{\dagger} c_{\lambda} \rangle (t)$
 (eigentlich gemessen: \dot{n})

Wie Observable berechnen?

$\vec{P}(\vec{r}, t), \vec{j}(\vec{r}, t) : \quad \rho(\vec{r}, t) = \sum_i \underline{\underline{\rho(\vec{r}_i)}} \delta(\vec{r} - \vec{r}_i(t))$
 $\xrightarrow{\text{2. Ordnung}} \int d^3r' \psi^{\dagger}(\vec{r}', t) \underline{\underline{\rho(\vec{r}')}} \delta(\vec{r} - \vec{r}') \psi(\vec{r}', t)$

Beispiel Dipolmoment:

$\vec{P}(\vec{r}, t) = \sum_i \underline{\underline{q \vec{r}_i(t)}} \delta(\vec{r} - \vec{r}_i(t)) \quad (\text{klass. ED})$

$\xrightarrow{\text{2. Ordnung}} \int d^3r' \psi^{\dagger}(\vec{r}', t) \underline{\underline{q \vec{r}'}} \delta(\vec{r} - \vec{r}') \psi(\vec{r}', t)$

$\vec{P}(\vec{r}, t) = \psi^{\dagger}(\vec{r}, t) \underline{\underline{q \vec{r}}} \psi(\vec{r}, t)$

Stromdichte: $q \dot{\vec{r}}_i \rightarrow q \dot{\vec{r}}_i \Rightarrow q \dot{\vec{r}} \rightarrow q \underline{\underline{\dot{\vec{P}}}}$

Modenmäßig:

$$\vec{\varphi}(\vec{r}, t) = \sum_{\mu, n} \varphi_{\mu}^*(\vec{r}) \vec{q}_{\mu} \varphi_{\mu}(\vec{r}) a_{\mu}^{\dagger}(t) a_{\mu}(t)$$

$$\left(\varphi^{\dagger} = \sum_{\mu} \varphi_{\mu}^* a_{\mu}^{\dagger} \right)$$

in Exp. i.a. schlech. Orbn./Gad. ab Skal. der Wellenf. $\varphi_{\mu}(\vec{r})$

Theorie: Mittlg. über Raumskale

$$\langle \vec{p} \rangle = \frac{1}{V} \int dV \varphi^{\dagger}(\vec{r}, t) \vec{q}_{\mu} \varphi(\vec{r}, t)$$

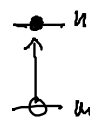
$$= \frac{1}{V} \int dV \underbrace{\sum_{\mu, n} \varphi_{\mu}^*(\vec{r}) \vec{q}_{\mu} \varphi_{\mu}(\vec{r})}_{\vec{d}_{\mu n}} \underbrace{a_{\mu}^{\dagger}(t) a_{\mu}(t)}_{\text{Übergänge}}$$

$\vec{d}_{\mu n}$ Dipolmoment des Atomverbands

(Annahme: )

Auswahlregel! $\vec{d}_{\mu n} \neq 0$

q_{μ}
Übergänge



erfüllt sich aus
Heisenb.-Bezugsgl.

2. Wechselwirkung von Elektronen und Photonen

$$H_{el} = T_{el} + V_{el-e} + W_{el-k}, \quad W_{el-k} = \sum_{i,k} W_{ik} = \sum_{i,k} \frac{-ze^2}{|\vec{r}_{i0} - \vec{r}_i - \vec{R}_k|}$$

Nullth Näh.: Born-Oppenheims Näh. mit fest. Kernen \vec{R}_k^0

→ Spin-Bal. Orbitale $\varphi_{\sigma}(\vec{r})$ festgelegt f. Elektronen

erste Näh.: Kerne können sich um Atomk. $\delta \vec{r}_i$ bewegen.

$$W_{d-k}(\vec{r}_i; -\vec{R}_k) \approx \sum_{ik} W_{ik}(\vec{r}_i; -\vec{R}_k^0) + \sum_{ikij} \delta q_i(k) \partial_{R_k^0} W_{ik}(\vec{r}_i; -\vec{R}_k^0)$$

1. Ordng. Taylor

$$\vec{R}_k = \vec{R}_k^0 + \delta \vec{R}_k, \quad \delta \vec{R}_k = \sum_j \vec{e}_j \delta q_j(k)$$

j: Kartes. K. des Kerna

$$= \sum_i W_{el-k}^0(\vec{r}_i) + \sum_{\alpha} (b_{\alpha}^+ + b_{\alpha}^-) \sum_{i,k} \left(\frac{t}{2m(k) \omega_k} \right)^{1/2} \vec{A}^k(\omega_k) \cdot \vec{\nabla}_{\vec{R}_k^0} W_{ik}(\vec{r}_i; -\vec{R}_k^0)$$

Potential f. Elektron
im feststeh. Kern
mit Orbital $\psi_e(\vec{r})$
f. die Elektron

$$\sum_{i,\alpha} (b_{\alpha}^+ + b_{\alpha}^-) \overline{W}_{\alpha}(\vec{r}_i)$$

Kernschwingg. Elektron

⇒ Wechselwirkung Elektron und Phonon
(Fermion) (Boson)

$$W_{d-k} \equiv W_{el-k}^0 + W_{el-k}^{\delta q}$$

↓
bestimmen Elektron-Orbitale → WW der Elektron-Orbitale mit Gitterschwingg.

Zweitquantisierung d. Elektronen:

$$H^{el} = \underbrace{T_{el} + V_{el-el} + W_{el-k}^0}_{\text{Elektron } \psi_e(\vec{r}), E_{el}^e \text{ ohne WW}} + \underbrace{H_{phonon}}_{\text{Kendynamik oder UW}} + \underbrace{W_{el-k}^{\delta q}}_{\text{WW}}$$

↑
" \vec{r}_i "

↑
" \vec{r}_i "

$$= \sum_e \frac{F_{ee}^c}{\epsilon_e} a_e^\dagger a_e + \sum_{\alpha} \frac{t_{\alpha}}{\epsilon_{\alpha}} b_{\alpha}^\dagger b_{\alpha} + \sum_{e, e', \alpha} t_{ee'}^{\alpha} a_e^\dagger a_{e'} (b_{\alpha}^\dagger + b_{\alpha})$$

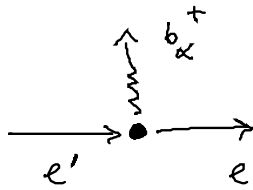
WW-Anteil: $\sum_i W_{\alpha}(\vec{r}_i) \xrightarrow{\text{zu. } \xi e'} \sum_{e, e'} \int d\vec{r} \varphi_e^*(\vec{r}) W_{\alpha}(\vec{r}) \varphi_{e'}(\vec{r}) a_e^\dagger a_{e'}$

$\equiv t_{ee'}^{\alpha}$ WW-Matrixelement
off plänkchenartige Modelle

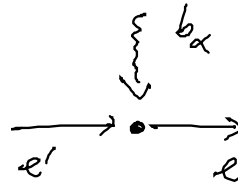
Beantwortung:

a) Hamiltonian f. Kopplg. v. Elektron an Kernschwingg. (Beschreibung der Normalmode "Quantilide" Phonone)


b) Wechselwirkg. = 2 Anteile:

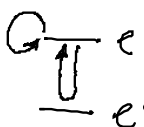


Phonon emission durch den Wechsel d. elektron. Zustands $e' \rightarrow e$.



Phonon absorption

$e' \rightarrow e$: echt Zustandsänderg.  "real Prozesse"

$e' = e$ virtuelle Zustandsänderg.  "virtuelle Prozesse"

3. Wechselwirkg. von Elektron und Photon

class. Mechanik:

$$H = \sum_i \frac{(\vec{p}_i + q \vec{A}(\vec{r}_i, t))^2}{2m_0} + \sum_i q \underbrace{\phi_{\text{Ken}}(\vec{r}_i)}_{\sum_k W_{ik}}$$

besser: Formulierung in Feldern $\vec{A} \rightarrow \vec{E}$
 Dipolnäherung um sich invariant f. ein Feld zu setzen:

$$H = \sum_i \left(\frac{\vec{p}_i^2}{2m_0} + q \phi_{\text{Ken}}(\vec{r}_i) - q \vec{r}_i \cdot \vec{E}(\vec{r}_i, t) \right)$$

effektives Potential (el-ken, el-el WW)

Eindringen $H \rightarrow$ 2. Ordnung.

$$= \sum_e \epsilon_e a_e^\dagger a_e - \int d^3r \underbrace{\psi^\dagger(\vec{r}, t) q \vec{r} \cdot \vec{E}(\vec{r}, t) \psi(\vec{r}, t)}_{\vec{r} \neq 0 \text{ f. Optik } \lambda \gg a_0}$$

Elektron-Photon-WW: hochenergetisch einsetzen

$$H_{\text{el-ph}}^{\text{halb}} = \sum_e \epsilon_e a_e^\dagger a_e - \sum_{e, e'} \vec{d}_{ee'} \cdot \vec{E}(t) a_{e'}^\dagger a_e$$

wenn $\vec{E}(t)$ klassisch behandelt: „semiklassisch Näherung“ $\rightarrow E$ klass.
 halb $\rightarrow a_e, a_e^\dagger$

kann vollquantisiert werden mit $\vec{E}(t) = i \sum_k \vec{e}_{1k} g_k c_{1k}(t) + \text{h.c.}$

c_{1k}, c_{1k}^\dagger Photon vermittelter und Energie, Bosonen

$$H_{el-ph}^{voll} = \sum_e \epsilon_e a_e^\dagger a_e - \left\{ \sum_{\substack{ee' \\ \lambda k}} t_{ee'}^{k\lambda} a_e^\dagger a_{e'} c_{\lambda k} + h.a. \right\}$$

voll quantisierte Beschreibung

$$t_{ee'}^{k\lambda} = i d_{ee'} \left(\frac{t_{\omega_k}}{2\epsilon_0 L^3} \right)^{1/2}$$

aus VL: Ordnung d. Störp.felds: $\vec{E}(t) = i \sum_{\lambda k} g_k c_{\lambda k}(t) + h.a.$

Interaktion ist komplett aus 2n EL-Photonen WL:

Photon emission $c_{\lambda k}^\dagger$ und Absorption $c_{\lambda k}$ f. virtuelle und reale Prozesse.

4. Methoden zur Behandl. der WL

a) stationären Prozesse: Schrödingerstörtheorie Bsp. Lamb shift, aber Verdräng. v. E-Niveaus

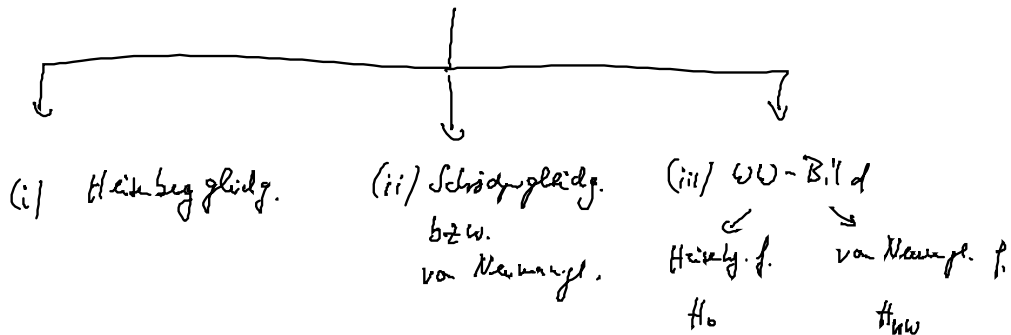
b) nichtstationären Prozesse:

Observable: Matrixelement + gem. Amplituden

Bsp. Dipolstärke: $\underline{d}_{ee'}$, $\langle a_e^\dagger a_{e'} \rangle(t)$

Integral ✓

zeitdynk von Observable $\underline{O} = a_e^\dagger a_{e'}$



$$\text{Bsp(i): } \langle \underline{O} \rangle = \text{sp}(\rho(t_0) O(t)), \quad \frac{d}{dt} O(t) = \frac{i}{\hbar} [H, O(t)]$$