Schrödingerfeld: $H = \sum_\mu \varepsilon_\mu \left(a_\mu^+ a_\mu + \frac{1}{2} \right)$

Bemerkungen

- beschrieben durch Satz harmonischer Oszillatoren
- Anregungen können Fermionen / Bosonen beschreiben (Plus / Minus - Quantisierung)

- Quantisierung beschreibt Quanteneffekte massiver Teilchen (Elektronen, Atome ...)

1.2.3 Quantisierung des elektromagnetischen Felds

a) Lagrangefunktion

$$\mathcal{L} = \frac{1}{2} \left(\varepsilon_0 E^2 - \frac{1}{\mu_0} B^2 \right)$$

keine Quellen: $\rho = 0 = \vec{j}$, im Vakuum

$\phi = 0$ man braucht kein skalares Potential

$\vec{A}$ reicht ! $\quad \vec{E} = -\partial_t \vec{A}$, $\quad \vec{B} = \vec{\nabla} \times \vec{A}$

$$\mathcal{L} = \frac{1}{2} \sum_{e=1}^{3} \left(\varepsilon_0 (\partial_t A_e)^2 - \frac{1}{\mu_0} (\vec{\nabla} \times \vec{A})_e^2 \right)$$

b) Impuls als Variable:

$$\Pi_{A_x} = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial(\partial_t A_x)} = \varepsilon_0 \partial_t A_x = -\varepsilon_0 E_x$$

E_x und A_x sind das kanonische Variablenpaar

c) Vertauschungsregeln:

$$[A_e(\vec{r},t), E_m(\vec{r}\,',t)] = \frac{i\hbar}{\varepsilon_0} \delta^{T}(\vec{r}-\vec{r}\,') \delta_{em}$$

spezielle δ-Funktion: „transversale Deltafunktion", „T"

müssen sicher stellen $\vec{\nabla} \cdot \vec{E} = 0$ im Vakuum

wird im weiteren nicht benötigt!

d) Feldoperatoren: $\underline{\vec{A}}$, $\underline{\vec{E}}$

e) Hamiltonoperator:

$$\mathcal{H} = (-\partial_t A)\cdot E\varepsilon_0 - \mathcal{L} = \frac{\varepsilon_0}{2}\vec{E}^2 + \frac{1}{2\mu_0}\vec{B}^2$$

$$H = \int d^3r \left(\frac{\varepsilon_0}{2} (\partial_t \underline{\vec{A}})^2 + \frac{1}{2\mu_0} (\vec{\nabla}\times\underline{\vec{A}})^2 \right)$$

f) Potentialgleichg.

$$\Box \underline{\vec{A}} = 0$$

g) Modeentwicklung:

analog zur Entwicklg $\underline{\Psi}^+ = \sum_\mu \varphi_\mu(\vec{r})\, \underline{a}_\mu^+(t)$,

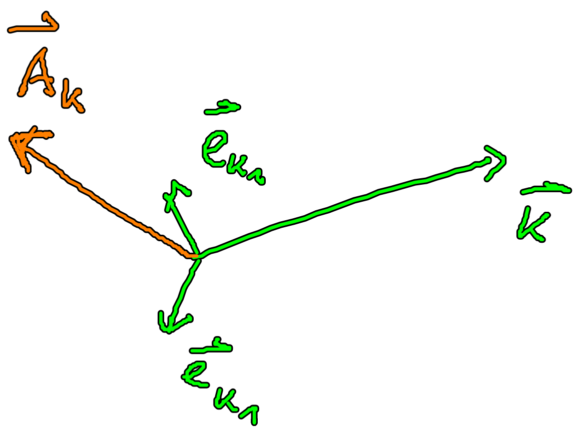
kommen an Eigenwertproblem $H_S \varphi_\mu = \varepsilon_\mu \varphi_\mu$

setzen wir an

$$\vec{A} = \sum_n u_n(\vec{r})\, a_n(t) + h.a.$$

wählen ebene Welle als vollständiges System:

löst $\Box \vec{A} = 0$, Quantenzahlen: $\vec{k}$, 2 linear unabhängige Vektoren $\perp$ zu $\vec{k}$



Amplitude, Operator d. Felds

$$\underline{\vec{A}} = \sum_{\vec{k}} f_k \sum_{\lambda(k)=1}^{2} \vec{e}_{k\lambda}\, e^{i(\vec{k}\vec{r} - \omega(k)t)}\, \underline{c}_{\lambda k} + \text{h.a.}$$

damit Einheit stimmt + Normierg.

orthogonale Vektoren

Funktionssystem

$$c_{\lambda k}(t) = e^{-i\omega t} c_{\lambda k}, \quad f_k = \left(\frac{\hbar^2}{2\varepsilon_0 c|k| L^3}\right)^{1/2}$$

Normierg. der ebenen Wellen

(analog wie a_μ für $\Psi(\vec{r},t)$)

$$-\partial_t \underline{\vec{A}} = \underline{\vec{E}} = \sum_{k\lambda} i g_k \vec{e}_{k\lambda} e^{ikr} c_{\lambda k}(t) + \text{h.a.}$$

$$g_k = \left(\frac{\hbar c|k|}{2\varepsilon_0 L^3}\right)^{1/2}$$

b) Darstellung von H in Moden

man muß $\vec{A}$ bzw $\vec{E}, \vec{B}$ in $H = \int d^3r \cdots f(\vec{A})$ einsetzen und rechnen:

$$H = \sum_{k\lambda} \hbar\omega_k \left(c^+_{\lambda k} c_{\lambda k} + \frac{1}{2}\right)$$

$$\omega_k = ck$$

$$(\vec{k}\times\vec{e}_{\lambda k})\cdot(\vec{k}\times\vec{e}_{\lambda' k}) = k^2(\vec{e}_{\lambda k}\cdot\vec{e}_{\lambda' k})$$

Bemerkungen:

- Strahlungsfeld im freien Raum ist durch Satz v. harmonischen Oszillatoren gegeben
- 2 wichtige Effekte können nur quantentheoretisch beschrieben werden
  a) Aufspaltung v. Linien bei H-Atom
  $$2S_{\frac{1}{2}} - 2P_{\frac{1}{2}}$$
  b) spontane Emission
  (Lampenlicht)

1.2.4 Energie-Eigenwertproblem für Feldmoden

zu lösen: $$a_\lambda^+ a_\lambda |n_\lambda\rangle = n_\lambda |n_\lambda\rangle$$

allgemeine Quantenzahl Besetzungszahl

λ kann sein: Photon: (λ, k)

Elektron: (λ, k)

Bandindex   Wellenzahl

Fermionen:

Quantenzahlen: $n_\lambda = 0, 1$ (Pauliprinzip)

Zustände: $|n_\lambda\rangle = (|0\rangle, |1\rangle)$

Bosonen:

Quantenzahlen: $n_\lambda = 0, 1, 2, 3 \ldots$

Zustände: $|n_\lambda\rangle = (|0\rangle, |1\rangle, |2\rangle \ldots)$

man hat durch die Darstellung über Moden eine einheitliche Sprache für Felder / Teilchen gefunden:

Elektron — elektromagnetisches Feld

1.3. Wechselwirkende Quantenfelder am Beispiel des Maxwell / Schrödingerfelds

in der Übungsaufgabe / Übung:

$$H = \sum_i \int d^3r \, \frac{1}{2m} \psi_i^\dagger(\vec r, t) \left(\frac{\hbar}{i} \nabla - q \vec A \right)^2 \psi_i(\vec r, t)$$

verschiedene Schrödingerfelder (Ionen / Elektronen)

Wechselwirkung mit Vektorpotential (transversal)

$$+ \sum_{i,j} \int d^3r \int d^3r' \, \frac{q_i q_j}{4\pi\varepsilon_0} \, \frac{\psi_i^\dagger(\vec r) \sum_j \psi_j^\dagger(\vec r') \psi_j(\vec r') \psi(\vec r)}{|\vec r - \vec r'|}$$

Coulombwechselwirkung (longitudinal)

1.4. Born-Oppenheimer-Näherung

Idee: wenn man System auf festkörperspezifische Eigenschaften untersucht, so wird genutzt

$\frac{m_{el}}{m_{ion}} \sim 10^{-3} - 10^{-5}$, daß El/Ion-Masse unterschiedlich sind $\rightarrow$ Grundlagen-VL

$\rightarrow$ **Problem zerfällt in 2 Anteile:**

Elektron

Kerne

a) Schrödingergleichg. f. Elektronen

$$\left(T_{el} + V_{el-el} + W_{el-Ion}\right)\varphi(i,k) = E_{el}(k)\,\varphi(i,k)$$

kinet. Energie d. Elektronen

Coulomb-WW

Elektr.-Ion WW mit festgehalten Kern (Parameter)

Schrödingergleichung für den elektronischen Anteil der Wellenfunktion und zwar im festgehaltenen Kernpotential.

b) Schrödingergl. für Kerne.

$$\left(T_k + V_{k-k} + E_{el}(k)\right)\chi(k) = E\,\chi(k)$$

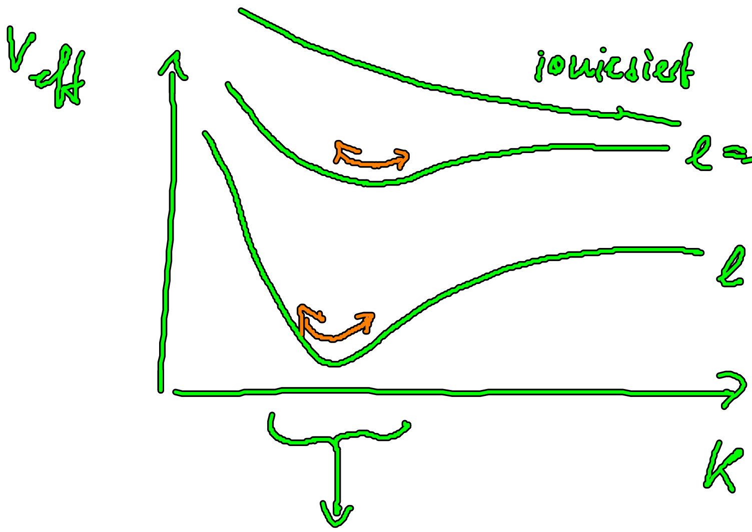
Schrödingergleichg. für die Kernwellenfunktion $\chi(k)$ im Potential der Kerne bei bekannter Elektronenenergie. E ist Gesamtenergie.

Lösg: 1) Lösg. von (a) $\forall$ Kernkoordinaten finden

2) mit $E_{el}(k)$ (6) lösen und

die Kernkonfiguration mit minimaler Energie E finden

Motivation f. Quantisierung d. Kerne

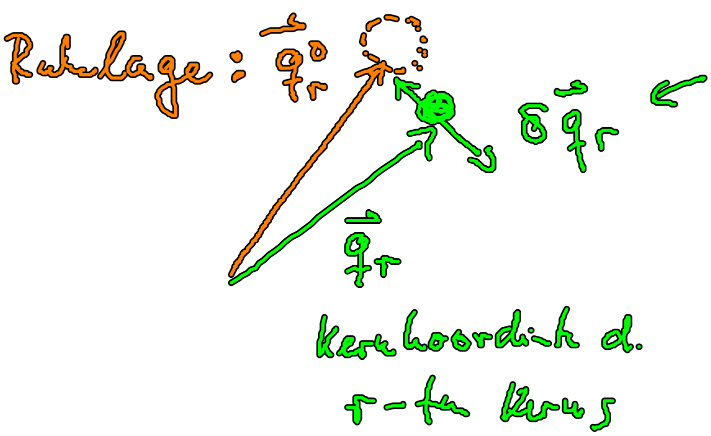


elektron. Zustand

$$V_{eff} = V_{K-K} + E^{e}_{el}(k)$$

Kerne quantisieren, um stationäre Ruhelage

in Gleichg. für $\chi(k)$



im Festkörper ist quadratische Entw. d. V_{eff} um die Ruhelagen sinnvoll

$$V_{eff} = V_{eff}(\vec{q}_r^{\,0}) + \frac{1}{2!}\sum_{i,j} \partial_{q_i^0}\partial_{q_j^0} V_{eff}\, \delta q_i\, \delta q_j$$

1. Ableitung verschwindet um die Ruhelage (Skizze oben)

$$\{\vec{q}_r\} \to \{q_i\}$$

1 bis 3N Koordinaten bei N Kernen

in dieser Schreibweise entstehen gekoppelte harmonische Oszillatoren:

$q_1 \bullet - - - - - \bullet\, q_n$

weil eine quadratische Form vorliegt, kann diese diagonalisiert werden und führt auf einen Satz entkoppelter harmonischer Oszillatoren

$$H = T_k + V_{eff}(k) = \sum_\alpha \left(\frac{p_\alpha^2}{2m_\alpha} + \frac{\omega_\alpha m_\alpha}{2} y_\alpha^2 \right) + V_{eff}(0)$$

neue Oszillatoren mit Masse m_α

p_α: Impuls

Ruhelage

y_α : Auslenkg.

ω_α : Frequenz

alte Koordinate : $\delta q_i = \sum_\alpha y_\alpha g_{\alpha i}$

werden nach den neuen entwickelt, $g_{\alpha i}$ wird aus den Eigenvektoren der zu diagonalisierenden Matrix gewonnen.

Damit kann man

$$H_{Kern} = \sum_\alpha \hbar \omega_\alpha \left(b_\alpha^+ b_\alpha + \frac{1}{2} \right)$$ schreiben

Aufsammeln einzelner Terme um Gesamt-H zu gewinnen

a) elektronischer Anteil :

1. Quantisierg :

$$H_{el} = \underbrace{T_{el} + V_{el-K}(q_n^0)}_{\text{Bewegg. in fester Kernpotential}} + \underbrace{V_{el-K}^{\delta q}(q_n^0)}_{\text{Bewegg. d. Kern bis zum 1. Term Taylor zulassen}}$$

$$V_{el-K} = \frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\sum_{m,i} \frac{-Ze^2}{|\vec{r}_i - \vec{q}_m|} \simeq V_{el-K}(q_m = q_m^0) + \underbrace{\frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\sum_{m,i} \vec{\nabla}_{q_m^0} \frac{-Ze^2}{|\vec{r}_i - \vec{q}_m|} \cdot \delta\vec{q}_m}_{V_{el-K}^{\delta q}}$$

einfachstes Modell

$$\underbrace{\delta\vec{q}_m = \sum_\alpha u_\alpha(t)\, \vec{g}_{\alpha m}}$$

damit kann Auslenkg. in neue Koordinaten ausgedrückt werden

<u>umsetzen in 2. Quantisierg:</u>

$$H = \sum_e -\frac{\hbar^2 \Delta_e}{\underline{\underline{2m}}} \longrightarrow \int d^3r\, \psi^+(r) -\frac{\hbar^2\Delta}{\underline{\underline{2m}}}\, \psi(r)$$

alle Elektronen

(1. Quantisierung)

$$H_{el} = \int d^3r\, \psi^+(r) \Big(\underbrace{-\frac{\hbar^2\Delta}{2m} + V_{el-K}(q_m^0)} + \underbrace{V_{el-K}^{\delta q}(q_m^0)} \Big) \psi(\vec{r})$$

dafür Moden wählen ← Bewegg. d. Elektrons in festem Gitter

WW Elektron. bewegende Kerne

Modenentwicklung anwenden: $H\varphi_e = \varepsilon_e \varphi_e$, $\Psi = \sum_e \varphi_e a_e$

$$H_{el} = \sum_e \varepsilon_e a_e^+ a_e + \sum_{e,e'} a_{e'}^+ a_e \left(b_\alpha^+ + b_\alpha\right) \underset{\substack{\uparrow \\ \text{der Rest}}}{g_\alpha^{ee'}}$$

aus: $\eta_\alpha(t) = \left(\frac{\hbar}{2m_\alpha}\right)^{1/2} \left(b_a^+ + b_a\right)$

≙ Umschreibg. eines Oszillatorkoordinate auf Erzeuger und Vernichter

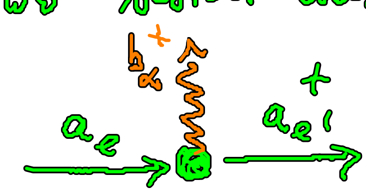
$$H_K = \sum_\alpha \varepsilon_\alpha b_\alpha^+ b_\alpha$$

Diskussion der Elektron-Ion Wechselwirkung

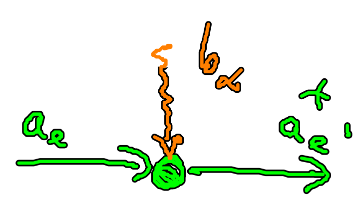
$$H_{WW} = \sum_{\substack{e,e' \\ \alpha}} \underset{\substack{\uparrow \\ \text{Erzeuger}}}{a_{e'}^+} \; \underset{\substack{\uparrow \\ \text{Vernichter}}}{a_e} \left(\underset{\substack{\downarrow \\ (1)}}{b_\alpha^+} + \underset{\substack{\downarrow \\ (2)}}{b_\alpha}\right) g_\alpha^{ee'}$$

H_{WW} besteht aus 2 Prozessen:

(1)



(2)



Elektron im Zustand l wird vernichtet | Elektron im Zustand l' wird erzeugt | $\hat{=}$

unter Erzeugg. eines Schwingungsquants | unter Vermittg. eines Schwingungsquants

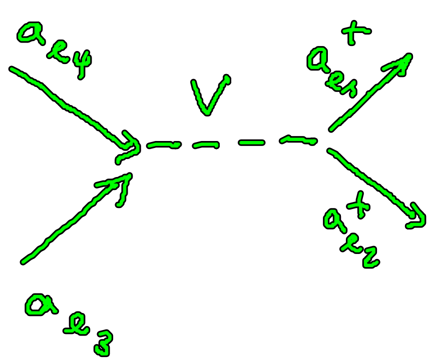
Beim Herleiten des elektronischen H haben wir die Coulomb-WW weggelassen V_{el-el}

in unserem Formalismus:

$$V_{el-el} = \frac{q^2}{4\pi\varepsilon_0} \int d^3r \int d^3r' \, \frac{\Psi^+(\vec{r})\,\Psi^+(\vec{r}\,')\,\Psi(\vec{r}\,')\,\Psi(\vec{r})}{|\vec{r} - \vec{r}\,'|}$$

in Modenentwicklung: $\Psi^+ = \sum_{l_i} a^+_{l_i} \varphi^*_{l_i}$, $\Psi = \sum_{l_i} \varphi_{l_i} a_{l_i}$

$$= V_{l_1 l_2 l_3 l_4}\, a^+_{l_1} a^+_{l_2} a_{l_3} a_{l_4}$$



Die Coulomb WW ist also als Streuprozeß

zwischen 2 Elektronen die ihre Zustände bei der Streuung verändern anzusehen

„Vernichtg. / Erzeugg." → bezieht sich auf die Quantenzahlen der Elektronen