3. 2. Observable

im Experiment werden typischerweise Größen wie Strom, Dipoldichte gemessen

$q \hat{=}$ Elektron $\qquad \vec r_i(t)$

Bsp: Dipoldichte $\quad \vec P = \sum_i q_i \vec r_i \, \delta(\vec r - \vec r_i) = \vec P(\vec r, t)$

Dipolmoment über alle Elektronen

$\vec r_i$ - Bahnkurve

$$\vec P(\vec r, t) = \Psi^+(\vec r, t)\, q \vec r \, \Psi(\vec r, t)$$

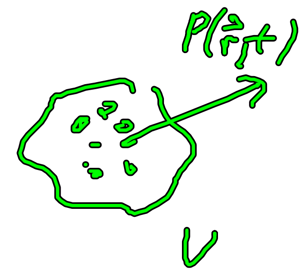
Dipoldichte in 2. er Quantisierg., später: Erwartungswert

→ Maxwellgleichungen

$$\vec P(\vec r, t) = \sum_{ij} \varphi_i^*(\vec r)\, a_i^+(t)\, q \vec r\, \varphi_j(\vec r)\, a_j(t)$$

Moden-entwicklung

Heisenbergbildoperatoren für Elektronen



$$= \sum_{ij} \frac{1}{V} \int d^3r\, \varphi_i^*(\vec r)\, q \vec r\, \varphi_j(\vec r)\; \underbrace{a_i^+(t)\; a_j(t)}$$

Dipolmoment $\vec d_{ij}$

Mittlg.

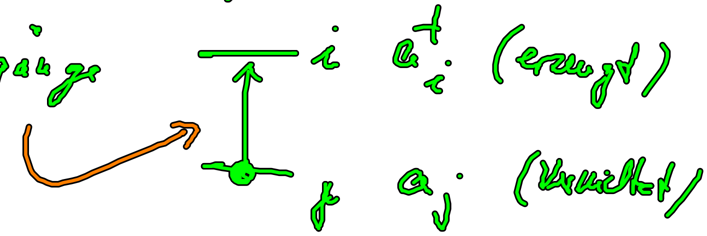
Mittlg. lt. Elektrodynamik

optische Übergänge

„Übergangsoperator" p_{ij}

Dipolmoment ist Übergangsstärke → Auswahlregeln

mikroskopische Polarisation / Übergänge



quantenmechanischer Erwartungswert:

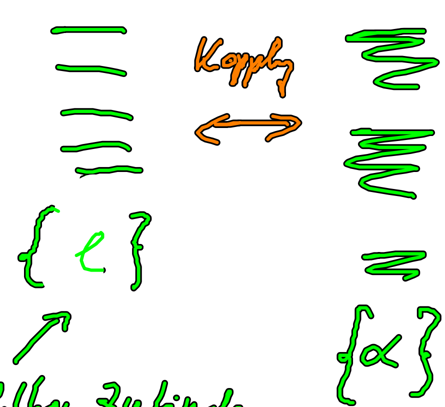
$$\langle \vec{P} \rangle_{\substack{ED\\QM}} = \frac{1}{V} \sum_{ij} \vec{d}_{ij} \cdot \langle p_{ij} \rangle_{QM}$$

gesucht!

3.3. Elektron Phonon Kopplung und Dipoldichte

Satz v. elektronischen Zuständen mit Anfangsbedingung $\langle p_{ij} \rangle \neq 0$ (durch optisches Feld), wie zerfällt dieser Zustand der angeregten Dipoldichte:

1) → durch Abstrahlung → später
2) → Kopplung an <u>Umgebung</u>



elektron. Zustände (lateinisch)

Oszillatoren (griechisch)

bei uns: Kernschwingg. (Phonon, Vibronen)

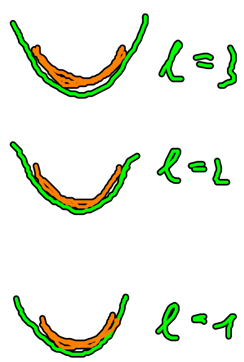
<u>Irreversibilität</u>: Ankopplg. des Systems (wenig Freiheitsgrade) an <u>viele</u> Freiheitsgrade der Umgebung

3.3.1 Hamiltonian

$$H = H_0 + V$$

$$H_0 = \underbrace{\sum_\ell \varepsilon_\ell a_\ell^\dagger a_\ell}_{\text{elektronisches System}} + \underbrace{\sum_\alpha \varepsilon_\alpha b_\alpha^\dagger b_\alpha}_{\text{Umgebung}}$$

$\cancel{\alpha}$, gilt $\forall \ell$

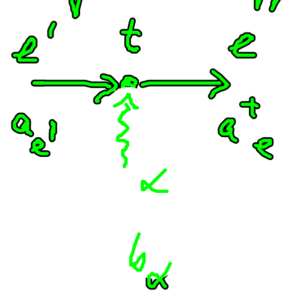


$$V = \sum_{\ell\ell'\alpha} \hbar\, g_\alpha^{\ell\ell'} \underbrace{a_{\ell'}^\dagger a_\ell \left(b_\alpha + b_\alpha^\dagger\right)}_{\text{WW-Prozesse}}$$

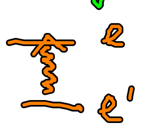
$g_\alpha^{\ell\ell'}$: WW-Matrix

<u>$\ell \neq \ell'$</u> nichtdiagonale Kopplg.

$a_\ell^\dagger a_{\ell'} b_\alpha$



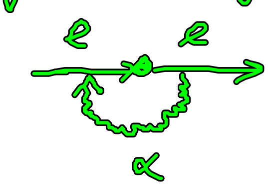
Elektronzustand wird geändert durch Phonon absorption, analog Photonemission



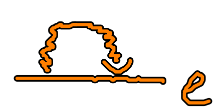
reeles Prozess

<u>$\ell = \ell'$</u> diagonale Kopplg.

$a_\ell^\dagger a_\ell b_\alpha$



Elektronzustand wird <u>nicht</u> geändert allerdings kommt eine Phase ändg. auf



virtuelles Prozess

besser schreiben: $V = \sum_{\ell\ell'} \phi^{\ell\ell'} a_{\ell'}^\dagger a_\ell$

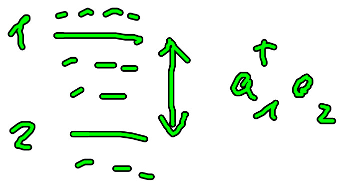
Operator des Phononen $\quad \phi^{ee'} = \sum_\alpha \hbar g_\alpha^{ee'} (b_\alpha + b_\alpha^+)$

3.3.2 Bewegungsgleichungen f. ρ_{ij}

es gilt die Heisenberg-Bewegungsgleichungen:

$$-i\hbar \partial_t \underline{O} = [\underline{H}, \underline{O}] \quad \text{für beliebige } \underline{O}$$

$$\underline{O} = a_1^+ a_2$$



(i) mit H_0 $\quad [H_0, a_1^+ a_2] = [\sum_i \varepsilon_i a_i^+ a_i, a_1^+ a_2]$

1. Anteil: $\varepsilon_i a_i^+ a_i a_1^+ a_2 = \varepsilon_i a_i^+ \underbrace{(\delta_{i1} - a_1^+ a_i)}_{\text{Fermikommutator}} a_2$

$$= \varepsilon_i a_i^+ a_2 \delta_{i1} - \varepsilon_i a_1^+ a_i^+ a_2 a_i$$

$$= \varepsilon_1 a_1^+ a_2 \delta_{i1} - \varepsilon_i (a_1^+ (\delta_{2i} - a_2 a_i^+) a_i)$$

$$= \underbrace{\varepsilon_1 a_1^+ a_2 \delta_{i1} - \varepsilon_2 a_1^+ a_2 \delta_{2i}}_{\text{mit } \sum_i \text{ ist } [H_0, a_1^+ a_2]} + \underbrace{a_1^+ a_2 a_i^+ a_i \varepsilon_i}_{\text{vertauschter Term}}$$

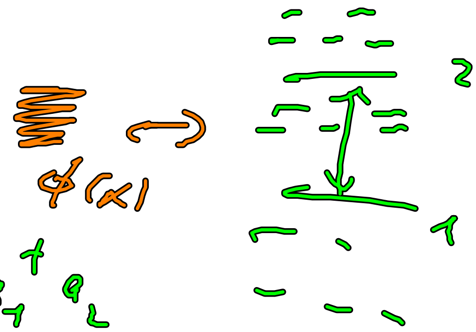
$$\to [H_0, a_1^+ a_2] = (\varepsilon_1 - \varepsilon_2) a_1^+ a_2$$

(ii) $[V_1, a_1^+ a_2] = [\sum_{ee'} \phi^{ee'} a_e^+ a_{e'}, a_1^+ a_2]$

mit Phonon vertauschbaren elektronischen Operatoren

$$= \sum_e \left(\phi^{e1} a_e^+ a_2 - \phi^{2e} a_1^+ a_e \right)$$

beide Terme aufsammeln:



$$-i\hbar\, \partial_t\, a_1^+ a_2 = (\varepsilon_1 - \varepsilon_2)\, a_1^+ a_2$$

$$+ \sum_e \left(\phi^{e1} a_e^+ a_2 - \phi^{2e} a_1^+ a_e \right)$$

- Ziel war Berechnung der Dipoldichte $\sim \langle a_1^+ a_2 \rangle$

beschreibt 1) die freie Rotation mit $(\varepsilon_1 - \varepsilon_2)\frac{i}{\hbar} = \omega_{12}$

2) $\langle a_1^+ a_2 \rangle$ koppelt an Phononen

- Operatorgleichung! nur eingeschränkt lösbar

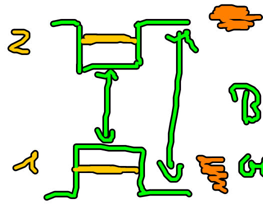
3.3.3 Wichtige Operatorbeziehungen am Beispiel eines eingeschränkten Modellsystems

wichtige Begriffe am Beispiel: Zweiniveausystem

$2 \quad g^{22}_\alpha \qquad g^{12} = 0$

$1 \quad g^{11}_\alpha \qquad$ nur virtuelle Prozesse!

künstliche Atome – Quantenpunkte



Bandkante unterschied. durch verschiedene Halbleiter

(c) Leitungsband

(v) Valenzband

$$\partial_t \underbrace{a_v^\dagger a_c} = i(\omega_v - \omega_c)\, a_v^\dagger a_c + i \overbrace{\sum_\alpha \left(g^{vv}_\alpha - g^{cc}_\alpha\right)\left(b_\alpha + b_\alpha^\dagger\right)}^{\phi(t)} a_v^\dagger a_c$$

$$\partial_t p(t) = i\,\omega_{vc}\, p(t) + i\,\phi(t)\, p(t)$$

$$\left(\partial_t p(t)\right) \cancel{e^{i\omega_{vc} t}} + i\omega_{vc}\, p(t)\, \cancel{e^{i\omega_{vc} t}}$$

$$= i\omega_{vc}\, p(t)\, \cancel{e^{i\omega_{vc} t}} + i\phi(t)\, p(t)\, \cancel{e^{i\omega_{vc} t}}$$

Notation $p(t) \to p(t)\, e^{i\omega_{vc} t}$

$$\partial_t p(t) = i\,\phi(t)\, p(t)$$

weitere Annahme: Phononsystem ist groß und viele Freiheitsgrade.

→ wird nicht gestört durch die WW

→ $b_\alpha^{(+)} = b_\alpha^{(+)}(t_0)\, e^{(\pm) i \omega_\alpha t}$: freie Bewegg. aus t_0

3.3.4 Die von Neumann Reihe

$$\partial_t p = i\phi p \longrightarrow p(t) = p(t_0) + i\int_{t_0}^{t} dt_1\, \phi(t_1)\, p(t_1)$$

implizit $\int \cdot \rho(t)$

Weiter Iteriren:

$$\rho(t) = \rho(t_0) + i\int^t dt_1\, \phi(t_1)\rho(t_0) + i^2 \int^t dt_1\, \phi(t_1) \int^{t_1} dt_2\, \phi(t_2)\rho(t_2)$$

$$= \left(1 + \sum_{n=1}^{\infty} (i)^n \int^t dt_1 \cdots \int^{t_{i-1}} dt_i \cdots \int^{t_{n-1}} dt_n\; \phi(t_1)\cdots\phi(t_i)\cdots\phi(t_n)\right)\rho(t_0)$$

bis ∞ Ordnung

formale Lösung als Reihe

$t \quad t_i \quad t_n$

Zeitordnung

Zeitordnung wäre kein Problem, wenn wir über

ϕ als Zahl reden

aufpassen $[\phi(t_i), \phi(t_j)] =$ unbekannt!

wenn das Zahl wären, dann ist Lsg. der Dgl. $\rho(t_0)\, e^{i\int^t dt' \phi(t')}$

wie findet man das wieder?

$$\rho(t_0)\left(1 + i\int^t dt' + \frac{1}{2!}\left(i\int dt'\right)^2 \cdots\right)$$

0. Term $\rho(t_0) \equiv 1$ oBdA

1. Term $i\int dt'\, \phi(t') \cdot 1$

2. Term : $i^2 \int^{t} dt_1 \int^{t_1} dt_2 \; \phi(t_1)\phi(t_2)$

$$= i^2 \frac{1}{2} \int^{t} dt_1 \int^{t_1} dt_2 \left(\phi(t_1)\phi(t_2) + \phi(t_1)\phi(t_2) \right)$$

① + umbenennung

② $t_1 \leftrightarrow t_2$

$$= i^2 \frac{1}{2!} \left(\int^{t} dt_1 \int^{t_1} dt_2 + \int^{t} dt_2 \int^{t_2} dt_1 \right) \phi(t_1)\phi(t_2)$$

$$= i^2 \frac{1}{2!} \left(\int^{t} dt_1 \int^{t} dt_2 \; \Theta(t_1 - t_2) + \int^{t} dt_2 \int^{t} dt_1 \; \Theta(t_2 - t_1) \right) \phi(t_1)\phi(t_2)$$

$$= i^2 \frac{1}{2!} \left(\int^{t} dt_1 \int^{t} dt_2 \left(\underbrace{\Theta(t_1 - t_2) + \Theta(t_2 - t_1)}_{1} \right) \phi(t_1)\phi(t_2) \right)$$

$$= i^2 \frac{1}{2!} \left(\int^{t} dt' \; \phi(t') \right)^2$$

ist der 2te Term der Exponentialreihe