Wh.: Kleine Schwingungen: $V(\underline{x}) = V(\underline{x}_0) + \frac{1}{2} q^T \underline{\underline{V}} q$ — Auslenkungen; Matrix der 2. Ableitungen

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

Lagrangefunktion: $L = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{f} \left(\dot{Q}_i^2 - \omega_i^2 Q_i^2 \right) \rightarrow \ddot{Q}_i(t) + \omega_i^2 Q_i(t) = 0$

$Q_i(t) = \alpha_i e^{i\omega t} + \beta_i e^{-i\omega t}$

„Normalmoden" entsprechen kollektiven Schwingungen des Systems! „Phononen"

$$H = \sum_{i=1}^{f} \dot{Q}_i \underbrace{\frac{\partial L}{\partial \dot{Q}_i}}_{P_i = \dot{Q}_i} - L$$

$$\Rightarrow \boxed{H = \sum_{i=1}^{f} \left(\frac{1}{2} P_i^2 + \frac{1}{2} \omega_i^2 Q_i^2 \right)} \quad (*)$$

Quantisierung:

Die Q_i und P_i in $(*)$ sind kanonisch konjugierte Variablen, d.h. $\{Q_k, P_j\} = \delta_{kj}$ (Poissonklammer)

$\Rightarrow$ Wir können direkt Korrespondenzprinzip anwenden!

$Q_k \rightarrow \hat{Q}_k$

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

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

Das sind f quantenmechanische harmonische Oszillatoren

Diese sind entkoppelt (d.h. $\hat{H} = \sum_{i=1}^{f} \hat{H}_i$ mit $\hat{H}_i = \frac{1}{2}(\hat{P}_i^2 + \omega_i^2 \hat{Q}_i^2)$)

$\rightarrow$ Lösung ist gegeben durch die Lösung für einen Oszillator

Lösung für einen Oszillator: (siehe Theoret.-Phys.-II)

$\hat{H}_i = \hbar\omega_i (\hat{N}_i + \frac{1}{2})$ mit $\hat{N}_i = \hat{a}_i^+ \hat{a}_i$

mit $\hat{a}_i = \sqrt{\frac{\omega_i}{2\hbar}}\, \hat{Q}_i + \frac{i}{\sqrt{2\hbar\omega_i}}\, \hat{P}_i$

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

$\hat{Q}_i^+ = \hat{Q}_i$

$\hat{P}_i^+ = \hat{P}_i$

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

also „bosonische" Vertauschungsrelation

Eigenzustände: $|n_i\rangle = \frac{(\hat{a}_i^+)^n}{\sqrt{n_i!}}|0\rangle_i$ Vakuumzustand für Oszillator i $(\hat{a}_i|0\rangle_i = 0)$

Eigenwert (von $\hat{H}_i$): $E_i = \hbar\omega_i(n_i + \frac{1}{2})$

Gesamtsystem:
$$\hat{H} = \sum_{i=1}^{f} \hat{H}_i$$

Entkopplung $\rightarrow$ Eigenzustände von $\hat{H}$ sind Produktzustände

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

mit $|n_1, n_2, \ldots, n_f\rangle = |n_1\rangle|n_2\rangle|n_3\rangle \ldots |n_f\rangle$

$$E(n_1, \ldots, n_f) = \sum_{i=1}^{f} E_i = \sum_{i=1}^{f} \hbar\omega_i(n_i + \tfrac{1}{2})$$

Interpretation

- Jedes Element i entspricht einem Oszillator.
  Der Eigenzustand $|n_i\rangle$ jedes dieser Oszillatoren, heißt n-Phononenzustand (wg. $|n_i\rangle = \frac{(\hat{a}_i^+)^n}{\sqrt{n_i!}}|0\rangle_i$

  d.h. wir ~~interpretieren~~ $\hat{a}_i^+$ Erzeuger (bzw. $\hat{a}_i$ als Vernichter)

  (im Gegensatz zur früheren Betrachtung als Auf- bzw. Absteiger)

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

  Bemerk.: Die hier vorkommenden Bosonen sind keine echten Teilchen, sondern kollektive Anregungen (Quasiteilchen)

- Die Interpretation als Quasiteilchen ist konsistent mit der Tatsache, dass sich die Energie E_T immer um ganzzahlige Vielfache der Eigenfrequenz ω_i ändern

Speziell Festkörper (Phononen)

Ersetze $\sum_{i=1}^{f}$ durch Summe über alle zulässigen Wellenvektoren $\underline{k}$ und einen "Zweigindex" s $\quad (i \to \underline{k}, s)$

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

Zum Zweigindex:

es gibt sog. akustische Moden ($\lim_{\underline{k}\to 0} \omega(\underline{k}) = 0$)

und optische Moden mit $\lim_{\underline{k}\to 0} \omega(\underline{k}) \neq 0$

akustische Moden $\hat{=}$ gleichphasige Schwingungen benachbarter Atome
optische " $\hat{=}$ gegenphasige " " "

IV.2. Quantisierung des (freien) elektromagnetischen Feldes

Klass. Beschreibung des elektromagnetischen Feldes

Maxwell-Gl. (SI)

$$\nabla \cdot \underline{E} = \frac{\overbrace{\rho(\underline{r},t)}^{\text{Ladungsdichte}}}{\varepsilon_0} \quad \text{(Gaußsches Gesetz)}, \quad \underline{E} = \underline{E}(\underline{r},t) \text{ elektr. Feld}$$

$$\nabla \times \underline{E} = -\frac{\partial}{\partial t} \underline{B} \quad \text{(Induktionsgesetz)}, \quad \underline{B} = \underline{B}(\underline{r},t) \text{ magnet. Feld}$$

$$\nabla \cdot \underline{B} = 0 \quad \text{(keine magnet. Monopole)}$$

$$\nabla \times \underline{B} = \mu_0 \varepsilon_0 \frac{\partial}{\partial t} \underline{E} + \mu_0 \underbrace{\underline{j}(\underline{r},t)}_{\text{Stromdichte}} \qquad (\mu_0 \varepsilon_0) = \frac{1}{c^2}$$

Hier angenommen: Keine Polarisations- bzw. Magnetisierungseffekte (kein umgebendes Medium, sondern isolierte Ladungen und Ströme)

$$\Rightarrow \underline{D} = \varepsilon_0 \underline{E}, \quad \underline{H} = (\mu_0)^{-1} \underline{B}$$

Umschreiben in Potentialgleichungen:

benutze: $\underline{B} = \nabla \times \underline{A}(\underline{r},t)$, $\underline{E} = -\nabla \phi(\underline{r},t) - \frac{\partial}{\partial t}\underline{A}(\underline{r},t)$

Vektorpotential — skalares Potential

$\underline{B}$ und $\underline{E}$ bleiben erhalten (invariant) unter „Eichtransformationen"

$$\underline{A} \to \underline{A} + \nabla \chi$$
$$\phi \to \phi - \dot{\chi}$$

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

Einsetzen in die Maxwellgleichungen liefert kompliziert gekoppelte Gleichungen!

Vereinfachung durch geeignete Eichtransformationen:

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

$\Rightarrow$ Potentialgleichungen:

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

$$\Delta\underline{A} - \frac{1}{c^2}\ddot{\underline{A}} = -\mu_0\,\underline{j}(\underline{r},t)$$

Bem.: - ϕ und $\underline{A}$ sind entkoppelt!

- Lorentzinvariant (2. Ableitungen für Ort und Zeit)

- führt auf Retardierungseffekte, z.B.

$$\phi(\underline{r},t) \sim \int d\underline{r}'\,\frac{\rho(\underline{r}',t')}{|\underline{r}-\underline{r}'|}\,,\quad t' = t - \frac{|\underline{r}-\underline{r}'|}{c}$$

Coulomb-Eichung

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

$\Rightarrow$ Potentialgleichungen:

- $$\Delta\phi = -\frac{\rho(\underline{r},t)}{\varepsilon_0}$$

d.h. völlig analog zu Elektrostatik (Poisson-Gleichung)!

$$\phi(\underline{r},t) \sim \int d\underline{r}'\,\frac{\rho(\underline{r}',t)}{|\underline{r}-\underline{r}'|}$$ instantan!

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

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

also verschwindende Ladungen und Ströme

("freies Strahlungsfeld")

$\Rightarrow$ Potentialgleichungen in der Coulombeichung:

$$\left(\Delta\phi = 0\right)$$

$$-\Delta\underline{A} + \frac{1}{c}\ddot{\underline{A}} = 0 \qquad (\text{und } \nabla\cdot\underline{A}=0)$$

Warum verschwindet der Term $\sim\dot{\phi}$ in der 2. Gleichung?

Antwort: In der Coulomb-Eichung ist für den Fall $\rho=0$ immer $\phi=0$

auch wenn bei $t=0$ Ladungen vorhanden waren

(Keine Retardierungseffekte!!

im Unterschied zu Lorenzeichung)

$\Rightarrow$ Die allein interessierende Gleichung ist die für das Vektorpotential

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

Lösung: (lineare partielle DGL 2. Ordnung in Ort und Zeit)

Ansatz:

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

„Entwicklung in Eigenmoden"

$\underline{u}_{\underline{k}}$, $\underline{u}_{\underline{k}}^*$: rein ortsabhängig

$\rightarrow$ Zeitabhängigkeit in den Exponentialfunktionen

a_k, a_k^* = (skalare) Konstanten

Bemerkungen zu (*)

- Damit (*) die Coulombeichung ($\nabla\cdot\underline{A}=0$) erfüllt, muss gelten:

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

Häufig spricht von "transversalen Moden"

Nehme dazu an, dass $\underline{u}_{\underline{k}}(\underline{r}) \sim e^{i\underline{k}\cdot\underline{r}}$ (oder Kombinationen → Fourier-Zerlegung)

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

⇒ $\underline{k}$ und $\underline{u}_{\underline{k}}$ müssen aufeinander senkrecht stehen

- (*) sollte Entwicklung in ein vollständiges Orthonormalsystem darstellen

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

- Bestimmung der "Eigenfrequenzen" $\omega_{\underline{k}}$:

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

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

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

$$+\,a_{\underline{k}}^*\,\underline{u}_{\underline{k}}^*(\underline{r})\,(i\omega_k)^2 e^{i\omega_k t}\Big) \overset{!}{=} 0$$

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

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

Frage neue:

Wie lautet der Hamiltonoperator zum elektromagnet. Feld in Abwesenheit von Ladungen und Strömen?

Fundierte Herleitung über Formalismus der Lagrangedichte (das holen wir nach!)

Hier: "Herleitung" über klass. Ausdruck für die Energiedichte

Energie

$$E = \int d\underline{r}\; \underbrace{\mathcal{E}(\underline{r},t)}_{\text{Energiedichte}} = \int d\underline{r} \left(\frac{1}{2}\varepsilon_0 \left(\underline{E}(\underline{r},t)\right)^2 + \frac{1}{2\mu_0}\left(\underline{B}(\underline{r},t)\right)^2 \right)$$

mit $\underline{E}(\underline{r},t) = -\dot{\underline{A}}(\underline{r},t)$

$\underline{B}(\underline{r},t) = \nabla \times \underline{A}(\underline{r},t)$

(denn $\phi = 0$!! Coulomb-Eichung!)

elektr. Feld

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

Quadriere und bilde Raumintegral

beachte dabei Orthogonalität $\int d\underline{r}\; u_{\underline{k}}^*(\underline{r})\, u_{\underline{k}'}(\underline{r}) = \delta_{\underline{k},\underline{k}'}$

$$\Rightarrow \int d\underline{r} \left(\underline{E}(\underline{r},t)\right)^2 = -\sum_{\underline{k},\underline{k}'} \left(\frac{\hbar\omega_k}{2\varepsilon_0}\right)^{\frac{1}{2}} \left(\frac{\hbar\omega_{k'}}{2\varepsilon_0}\right)^{\frac{1}{2}} \underbrace{a_{\underline{k}}\, a_{\underline{k}'}\, i e^{-i(\omega_k+\omega_{k'})t} \int d\underline{r}\; u_{\underline{k}}(\underline{r})\, u_{\underline{k}'}(\underline{r})}_{\text{Komplex konjugiert}}$$

$$- \quad " \quad " \quad "$$

$$+ \sum_{\underline{k}} \left(\frac{\hbar\omega_k}{2\varepsilon_0}\right) a_{\underline{k}}\, a_{\underline{k}}^* + \sum_{\underline{k}} \left(\frac{\hbar\omega_k}{2\varepsilon_0}\right) a_{\underline{k}}^*\, a_{\underline{k}}$$

Magnetischer Anteil

zu berechnen: $\int d\underline{r} \left(\underline{B}(\underline{r},t)\right)^2$, $\underline{B} = \nabla \times \underline{A}$

$\Rightarrow$ Terme der Form $\int d\underline{r} \left((\nabla \times \underline{u}_{\underline{k}}(\underline{r}))(\nabla \times \underline{u}_{\underline{k}'}(\underline{r})) \right)$

benutze Identität: $\nabla \cdot (\underline{u}_1 \times \underline{u}_2) = \underline{u}_2(\nabla \times \underline{u}_1) - \underline{u}_1(\nabla \times \underline{u}_2)$ (**)

hier setze: $\underline{u}_2 = \nabla \times \underline{u}_{\underline{k}}(\underline{r})$, $\underline{u}_1 = \nabla \times \underline{u}^*_{\underline{k}'}(\underline{r})$

$$\int d\underline{r}\; \underline{u}_2 \cdot (\nabla \times \underline{u}_1) \overset{(**)}{=} \underbrace{\overset{\text{Flächenintegral!}}{\int} d\underline{F}\,(\underline{u}_1 \times \underline{u}_2)}_{\text{Gauß'scher Integralsatz}} + \int d\underline{r}\; \underbrace{\nabla \times (\overbrace{\nabla \times \underline{u}_{\underline{k}}(\underline{r})}^{u_2})}\; \overbrace{u^*_{\underline{k}'}(\underline{r})}^{u_1}$$

Verschwindet, da $\underline{A}$ auf dem Rand Null sein soll

$\mathrm{rot}\,(\mathrm{rot}\,\underline{F})$ beliebiges Vektorfeld

$= \nabla(\nabla \cdot \underline{F}) - \Delta \underline{F}$

grad div

$\underline{F} = u_{\underline{k}}(\underline{r})$

$$= \int d\underline{r}\; \nabla \cdot \underbrace{(\nabla \cdot u_{\underline{k}}(\underline{r}))}_{\substack{\text{Null wegen}\\ \text{Coulombeichg!}}}\; u^*_{\underline{k}'}(\underline{r}) - \int d\underline{r}\; \Delta u_{\underline{k}}(\underline{r})\, u^*_{\underline{k}'}(\underline{r})$$

$$= -\int d\underline{r}\; \Delta u_{\underline{k}}(\underline{r})\; u^*_{\underline{k}'}(\underline{r})$$

$$\boxed{\left(\Delta + \frac{\omega_k^2}{c^2}\right) u_{\underline{k}}(\underline{r}) = 0}$$

$$= \frac{\omega_k^2}{c^2} \int d\underline{r}\; u_{\underline{k}}(\underline{r})\, u^*_{\underline{k}'}(\underline{r}) = \omega_k^2\, \varepsilon_0 \mu_0\, \delta_{kk'}$$