

Wk: kleine Schwingung : $V(x) = V(x_0) + \frac{1}{2} q^T V'' q$ ^{Ausdrücken} Matrix der 2. Ableiten

Normalkoordinaten: $q = A Q$

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

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

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

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

„Normalmoden“
entsprechen Normalformen
Schwingung des Systems!
„Phasoren“

Quantisierung:

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

$\Rightarrow$ Wir können direkt Korrespondenzprinzip anwenden!

$$\begin{aligned} Q_k &\rightarrow \hat{Q}_k \\ P_j &\rightarrow \hat{P}_j \end{aligned} \quad \text{mit } [\hat{Q}_k, \hat{P}_j] = i\hbar \delta_{kj}$$

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

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 eine Oszillate

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

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

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

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

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

$$\begin{aligned} \hat{Q}_i^\dagger &= \hat{Q}_i \\ \hat{P}_i^\dagger &= \hat{P}_i \end{aligned}$$

also „bosonische“ Vertauschungsrelation

$$\text{Eigenzustand: } |n_i\rangle = \frac{(a_i^\dagger)^n}{\sqrt{n_i!}} |0\rangle_i$$

Vakuumzustand für Oszillator i

$$\text{Eigenwert: } E_i = \hbar \omega_i \left(n_i + \frac{1}{2}\right) \quad (\hat{a}_i |0\rangle_i = 0)$$

(von $\hat{H}_i$)

Gesamtsystem:

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

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

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

$$\text{mit } |n_1, n_2, \dots, n_f\rangle = |n_1\rangle |n_2\rangle |n_3\rangle \dots |n_f\rangle$$

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

Interpretation

- Jeder Element i entspricht einem Oszillator.

Der Eigenzustand $|n_i\rangle$ jedes eines Oszillators, heißt n -Phononenzustand

$$(\text{wg. } |n_i\rangle = \frac{(a_i^\dagger)^n}{\sqrt{n_i!}} |0\rangle_i)$$

d.h. wir interpretieren $a_i^\dagger$ Erzeuger (bzw. a_i als Annihilator)

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

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

Beachte: Die hier vorkommenden Bosonen sind klassen von Teilchen, sondern kollektive Anregungen (Quasiteilchen)

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

Speziell Festkörper (Phonon)

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

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

Zum Zweigindex

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

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

akustische Moden $\hat{=}$ gleichplangige Schwingungen benachbarter Atome

optische " $\hat{=}$ gegenplangige " " " "

IV.2. Quantisierung des (freien) elektromagnetischen Feldes

Klass. Beschreibung des elektromagnetischen Feldes

Maxwell-Gl. (SI) (adaptiert)

$$\nabla \cdot \underline{E} = \frac{\rho(\underline{r}, t)}{\epsilon_0} \quad , \quad \underline{E} = \underline{E}(\underline{r}, t) \quad \text{elektr. Feld}$$

(Gaußsches Gesetz)

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

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

$$\nabla \times \underline{B} = \mu_0 \epsilon_0 \frac{\partial}{\partial t} \underline{E} + \mu_0 \underline{j}(\underline{r}, t) \quad (\mu_0 \epsilon_0) = \frac{1}{c^2}$$

(Strömungsdichte)

Hier angenommen: Keine Polarisation - bzw. Magnetisierungseffekte (Kein ungeordnetes Medium, sondern ideale Leiter und Ströme)

$$\Rightarrow \underline{D} = \epsilon_0 \underline{E} \quad , \quad \underline{H} = \frac{1}{\mu_0} \nabla \times \underline{B}$$

Umschreiben in Potentialgleichungen:

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

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

$$\begin{aligned} \underline{A} &\rightarrow \underline{A} + \nabla \chi \\ \phi &\rightarrow \phi - \dot{\chi} \end{aligned} \quad \text{mit } \chi = \chi(\underline{r}, t)$$

Einssetzen in die Maxwellgleichungen liefert komplett gekoppelte Gleichungen!

Vereinfachung durch geeignete Eichtransformationen:

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

$\Rightarrow$ Potentialgleichungen: $\Delta \phi - \frac{1}{c^2} \ddot{\phi} = -\frac{\rho(\underline{r}, t)}{\epsilon_0}$

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

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

- Lorenzinvarianz (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:

$$\Delta \phi = -\frac{\rho(\underline{r}, t)}{\epsilon_0}$$

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

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

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

Wir spezialisieren jetzt (zunächst) auf den Fall $\rho(\underline{r}, t) = 0$, $\dot{\rho}(\underline{r}, t) = 0$
 also verschwindende Ladung und Strom
 ("freies Strahlungsfeld")

$\Rightarrow$ Potentialgleichungen in der Coulombbeziehung:

$$\begin{aligned} (\Delta \Phi &= 0) \\ -\Delta \underline{A} + \frac{1}{c^2} \ddot{\underline{A}} &= 0 \quad (\text{und } \nabla \cdot \underline{A} = 0) \end{aligned}$$

Warum verschwindet der Term $\sim \Phi$ in der 2. Gleichung?

Antwort: In der Coulomb-Beziehung ist für den Fall $\rho = 0$ immer $\Phi = 0$
 auch wenn bei $t = 0$ Ladungen vorhanden waren
 (keine Retardierungseffekte!)
 im Unterschied zu (Austausch)

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

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

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

Ansatz:

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

"Entwicklung in Eigenmoden"

$u_{\underline{k}}, u_{\underline{k}}^*$: räumlich abhängig

$\rightarrow$ Zeitabhängigkeit in der Exponentialfunktion

$a_{\underline{k}}, a_{\underline{k}}^*$: (skalare) Konstanten

Bemerkung zu (*):

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

• Damit (*) die Coulombbeziehung erfüllt, muss gelten:

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

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 $\rightarrow$ Fourier-Analysis)

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

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

• (*) setzt sich in ein vollständiges Orthonomalsystem dar

$$\Rightarrow \text{für jedes } \int d\underline{r} \underline{u}_{\underline{k}}^*(\underline{r}) \underline{u}_{\underline{k}'}(\underline{r}) = \delta_{\underline{k}, \underline{k}'}$$

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

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

$$\begin{aligned} - \sum_{\underline{k}} \left(\frac{4\pi}{2\omega_{\underline{k}} c_0} \right)^{\frac{1}{2}} \left(\underline{a}_{\underline{k}} \Delta \underline{u}_{\underline{k}}(\underline{r}) e^{-i\omega_{\underline{k}} t} + \underline{a}_{\underline{k}}^* \Delta \underline{u}_{\underline{k}}^*(\underline{r}) e^{+i\omega_{\underline{k}} t} \right) \\ + \frac{1}{c^2} \sum_{\underline{k}} \left(\frac{4\pi}{2\omega_{\underline{k}} c_0} \right)^{\frac{1}{2}} \left(\underline{a}_{\underline{k}} \underline{u}_{\underline{k}}(\underline{r}) (-i\omega_{\underline{k}})^2 e^{-i\omega_{\underline{k}} t} \right. \\ \left. + \underline{a}_{\underline{k}}^* \underline{u}_{\underline{k}}^*(\underline{r}) (i\omega_{\underline{k}})^2 e^{+i\omega_{\underline{k}} t} \right) \stackrel{!}{=} 0 \end{aligned}$$

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

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

Frage neues

Wie lautet die Hamiltonoperator zum elektromagnet. Feld in Abwesenheit von Ladung und Strömen?

Indirekte Herleitung über Formalismus der Gegengleich (das haben wir noch!)

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

Energie

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

mit $\underline{E}(\underline{r}, t) = -\dot{\underline{A}}(\underline{r}, t)$ (dann $\phi=0$!! Coulomb-Sich!)
 $\underline{B}(\underline{r}, t) = \nabla \times \underline{A}(\underline{r}, t)$

elekt. Feld

$$\underline{E} \rightarrow -\dot{\underline{A}} = i \sum_{\underline{k}} \left(\frac{\hbar \omega_{\underline{k}}}{2 \varepsilon_0} \right)^{\frac{1}{2}} (a_{\underline{k}} u_{\underline{k}} e^{-i \omega_{\underline{k}} t} - a_{\underline{k}}^* u_{\underline{k}}^* e^{+i \omega_{\underline{k}} t})$$

Quadrieren und bilde Raumintegral

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

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

Magnetische Anteil

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

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

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

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

$$\int d\mathbf{r} \underline{u}_2 \cdot (\nabla \times \underline{u}_1) \stackrel{**}{=} \underbrace{\int d\mathbf{r} (\underline{u}_1 \times \underline{u}_2)}_{\substack{\text{Poincaré-Integral!} \\ \text{Gauß'scher} \\ \text{Integralsatz}}} + \int d\mathbf{r} \nabla \times (\overbrace{\nabla \times \underline{u}_K(r)}^{\underline{u}_2}) \cdot \overbrace{\underline{u}_{K'}^*(r)}^{\underline{u}_1}$$

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

rot (rot $\underline{F}$) heißt $\nabla \times \underline{F}$
 $= \nabla (\nabla \cdot \underline{F}) - \Delta \underline{F}$
 grad div
 $\underline{F} = \underline{u}_K(r)$

$$= \int d\mathbf{r} \nabla \cdot (\underbrace{\nabla \times \underline{u}_K(r)}_{\substack{\text{Null wegen} \\ \text{Coulombbedg.}}}) \cdot \underline{u}_{K'}^*(r) - \int d\mathbf{r} \Delta \underline{u}_K(r) \cdot \underline{u}_{K'}^*(r)$$

$$= - \int d\mathbf{r} \Delta \underline{u}_K(r) \cdot \underline{u}_{K'}^*(r)$$

$$\Delta + \frac{\omega_K^2}{c^2} \underline{u}_K(r) = 0$$

$$\checkmark = \frac{\omega_K^2}{c^2} \int d\mathbf{r} \underline{u}_K(r) \cdot \underline{u}_{K'}^*(r) = \omega_K^2 \epsilon_0 \mu_0 d_{KK'}$$