

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

### 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:  $\rho = 0 = \bar{j}$ , im Vakuum

$\phi = 0$  man braucht kein skalares Potential

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

$$\mathcal{L} = \frac{1}{2} \sum_{e=1}^3 \left( \epsilon_0 (\partial_t A_e)^2 - \frac{1}{\mu_0} (\vec{\nabla} \times \vec{A})_e^2 \right)$$

b) Impulsvariable:

$$\bar{\Pi}_{A_x} = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial (\partial_t A_x)} = \epsilon_0 \partial_t A_x = -\epsilon_0 \vec{E}_x$$

$\vec{E}_x$  und  $A_x$  sind das kanonische Variable paar

c) Vertauschungsregeln:

$$[A_e(\vec{r}_1, t), E_m(\vec{r}'_1, t)] = \frac{i\hbar}{\epsilon_0} \delta(\vec{r} - \vec{r}') \delta_{em}$$

speziell  $\delta$ -Funktion: „transversale Deltafunktion“, „ $\vec{\nabla} \cdot \vec{E} = 0$ “

wissen sie stellen  $\vec{\nabla} \cdot \vec{E} = 0$  im Vakuum

wird im weiteren nicht benötigt!

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

e) Hamiltonoperator:

$$\mathcal{H} = (-\partial_t A) \cdot \vec{E} \epsilon_0 - \mathcal{L} = \frac{\epsilon_0}{2} \vec{E}^2 + \frac{1}{2\mu_0} \vec{B}^2$$

$$H = \int d^3r \left( \frac{\epsilon_0}{2} (\partial_t \vec{A})^2 + \frac{1}{2\mu_0} (\vec{\nabla} \times \vec{A})^2 \right)$$

f) Potentialgleichung:

$$\square \vec{A} = 0$$

g) Modeentwicklung:

analog zur Entwicklung  $\psi^+ = \sum_{\mu} \psi_{\mu}(\vec{r}) a_{-\mu}^+(t)$ ,

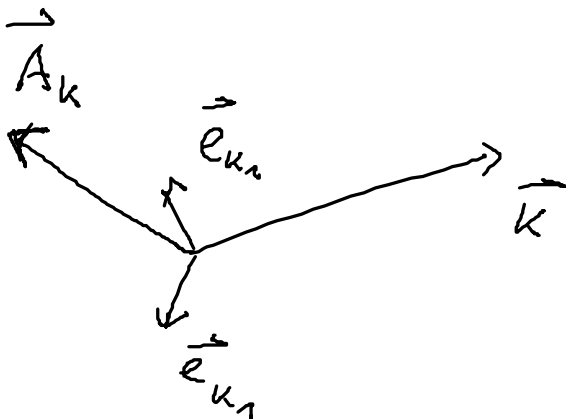
kann an Eigenwertproblem  $H_S \psi_{\mu} = \epsilon_{\mu} \psi_{\mu}$

setzen wir an

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

Wählen oben Wellen als vollständiges System:

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



Amplitude,  
Operatoren d. Felds

$$\vec{A} = \sum_{\vec{k}} \int_k \sum_{\lambda(k)=1}^2 \vec{e}_{k\lambda} e^{i(\vec{k}\vec{r} - \omega(k)t)} \left( c_{\lambda k} + h.a. \right)$$

$\int_k$   $\nearrow$  damit Einheit stimmt + Normierung.  
 $\vec{e}_{k\lambda}$   $\searrow$  orthogonale Vektoren  
 $c_{\lambda k}$   $\searrow$  Funktionssystem

$$c_{\lambda k}(t) = e^{-i\omega t} c_{\lambda k}, \quad \int_k = \left( \frac{\frac{1}{4}}{2\epsilon_0 c |\vec{k}| L^3} \right)^{1/2}$$

(analog wie  $a_\mu$  für  $\varphi(\vec{r}, t)$ )

$\int_k$   
 $\downarrow$   
 Normierung  
 der ebenen  
 Wellen

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

$$g_k = \left( \frac{\frac{1}{4} c |\vec{k}|}{2\epsilon_0 L^3} \right)^{1/2}$$

h) Darstellung von  $H$  in Mode

man wip  $\vec{A}$  bzw  $\vec{E}, \vec{B}$  in  $H = \int d^3r \dots f(\vec{A})$

einsetzen und rechnen:

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

$$\omega_k = c k$$

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

### Bemerkungen:

- Strahlungsfeld im freien Raum ist durch Satz v. Lorenz durch Maxwell'sche Oszillatoren gegeben
- Zweifelhafte Effekte können nur quantenmechanisch 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 Feldmode

Zu lösen:  $a_{\lambda}^{\dagger} a_{\lambda} |n_{\lambda}\rangle = n_{\lambda} |n_{\lambda}\rangle$

$\uparrow$   $\uparrow$   
 allgemein Quantenzahl Besetzungszahl

$\lambda$  kann sein: Photon:  $(\lambda, k)$   
 Elektron:  $(\lambda, k)$   
                    $\uparrow$            $\uparrow$   
                   Bandindex  Wellenzahl

Fermionen:

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

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

Bosonen:

Quantenzahl:  $n_\lambda = 0, 1, 2, 3 \dots$

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

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

Elektron - elektromagnetisch Feld

1.3. Wechselwirkende Quantenfelder

am Beispiel des Maxwell / Schrödingerfelds

in der Übungsaufgabe / Übung:

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

↑  
verschiedene Schrödingerfelder  
(Ionen / Elektronen)

↑  
Wechselwirkung mit  
Vektorpotential (transversal)

$$+ \sum_{i,j} \int d^3r \int d^3r' \frac{q_i q_j}{4\pi \epsilon_0} \frac{\psi_i^\dagger(\vec{r}) \sum_j \psi_j^\dagger(\vec{r}') \psi_j(\vec{r}') \psi_i(\vec{r})}{|\vec{r} - \vec{r}'|}$$

↑  
Coulombwechselwirkung (longitudinal)

## 1.4. Born-Oppenheimer-Näherung

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

$$\frac{m_{el}}{m_{ion}} \sim 10^{-3} - 10^{-5}, \text{ daß El/Ion-Massen}$$

unterschiedlich sind  $\rightarrow$  Grundlagen-VL

$\rightarrow$  Problem zerfällt in 2 Anteile:

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  
 der Elektronen
     
 Coulomb-WW
     
 Elektro- (ion) WW  
 mit festgehaltenem  
 Kern  
 (Parameter)

Elektron  
 ↓  
 Kerne

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.

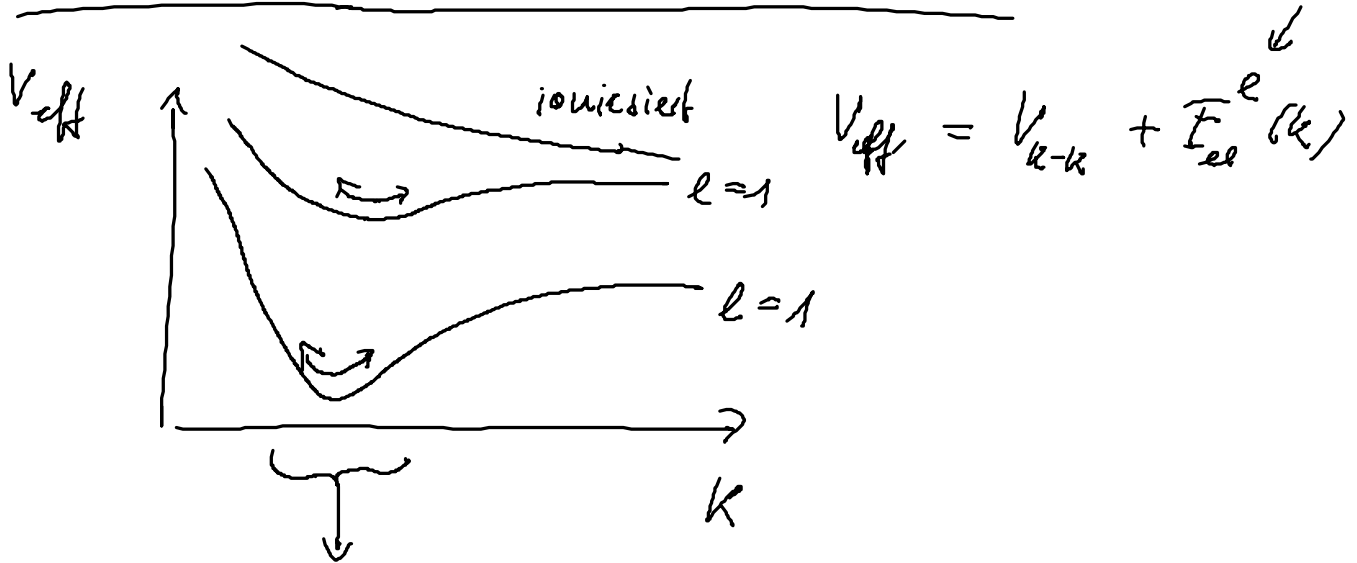
Lösung: 1) Lösung von (a) w. Kernkoordinaten finden



2) mit  $F_{el}(k)$  (b) lösen und die Kernkonfiguration mit minimaler Energie  $F$  finden

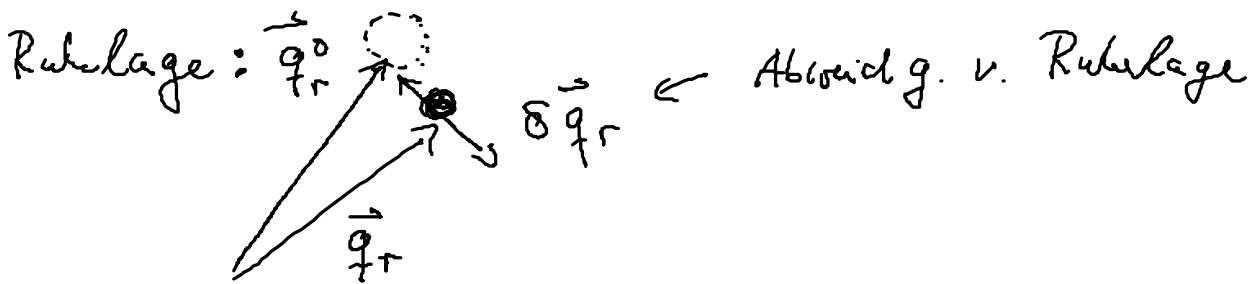
Motivation f. Quantisierung d. Kerne

electron. Zustand



Kerne quantisieren, um stabile Ruhepunkte

in Gl. 1. für  $X(k)$



Kernkoordinat d.  $r$ -ten Kerne

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

$$V_{\text{eff}} = V_{\text{eff}}(\vec{q}_r) + \frac{1}{2!} \sum_{ij} \frac{\partial^2 V_{\text{eff}}}{\partial q_i \partial q_j} \delta q_i \delta q_j$$

1. Ableitung verschwindet an  
die Ruhelage (Skizze oben)

$$\left\{ \vec{q}_r \right\} \rightarrow \left\{ q_i \right\}$$

1 bis  $3N$  Koordinat bei  $N$  Kernen

in dieser Schrittweite entstehen gekoppelte

harmonische Oszillatoren:



weil eine quadratische Form vorliegt, kann diese  
diagonalisiert werden und führt auf

eine Satz entkoppelter harmonischer Oszillatoren

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

↑  
neue Oszillatoren  
mit Masse  $m_{\alpha}$

↑  
Ruhelage

$p_{\alpha}$ : Impuls

$\gamma_\alpha$  : Auslenkung

$\omega_\alpha$  : Frequenz

$$\text{alte Koordinate: } \delta q_i = \sum_\alpha \gamma_\alpha q_{\alpha i}$$

Werde nach dem Alter entwirrt,  $q_{\alpha i}$  wird aus den Eigenvektoren des zu diagonalisierenden Matrix gewonnen.

Damit kann man

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

Aufsumme einzelner Terme um Gesamt-H zu gewinnen

a) elektronisch Anteil:

1. Quantisierung:

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

Bewegg. in feste  
Kernpotential

Bewegg. d. Kern  
bis zum 1. Term  
Taylor zulassen

$$V_{el-k} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \sum_{m,i} \frac{-ze^2}{|\vec{r}_i - \vec{q}_m|} \approx V_{el-k}(q_m = q_m^0) + \underbrace{\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \sum_{m,i} \frac{-ze^2}{|\vec{r}_i - \vec{q}_m^0|} \cdot \delta \vec{q}_m}_{V_{el-k}^{\delta q}}$$

↑  
einfaches Modell

$$\delta \vec{q}_m = \sum_{\alpha} y_{\alpha}(t) \vec{q}_{\alpha m}$$

damit kann Auslsg. in neue Koord. netz ausgedrückt werden

umsetzen in 2. Quantisierung:

$$H = \sum_e \frac{\hbar^2 \Delta_e}{2m_e} \rightarrow \int d^3r \psi^\dagger(r) \frac{\hbar^2 \Delta}{2m} \psi(r)$$

↑  
alle Elektronen

(1. Quant.)

$$H_{el} = \int d^3r \psi^\dagger(r) \left( \underbrace{-\frac{\hbar^2 \Delta}{2m} + V_{el-k}(q_m^0)}_{\text{Beweg. d. Elektronen in festen Gitter}} + \underbrace{V_{el-k}^{\delta q}(q_m^0)}_{\text{WS Elektron. bewegend Kerne}} \right) \psi(r)$$

da für Moden wählen

Modenentwicklung anwenden:  $H\psi_e = \epsilon_e \psi_e$ ,  $\psi = \sum_e \psi_e a_e$

$$H_{el} = \sum_e \epsilon_e a_e^\dagger a_e + \sum_{e, e'} a_{e'}^\dagger a_e (b_\alpha^\dagger + b_\alpha) g_{\alpha}^{ee'}$$

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

↑  
der Rest

≙ Umschreibg. eines Oszillatorkoordinaten auf Erzeuger und Vernichter

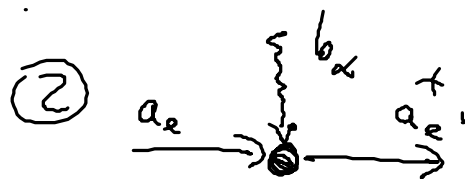
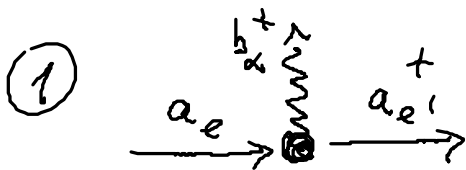
$$H_k = \sum_\alpha \epsilon_\alpha b_\alpha^\dagger b_\alpha$$

Diskussion der Elektron-phon Wechselwirkung

$$H_{hw} = \sum_{e, e'} a_{e'}^\dagger a_e (b_\alpha^\dagger + b_\alpha) g_{\alpha}^{ee'}$$

$\uparrow$     $\uparrow$     $\downarrow$     $\downarrow$   
 Erzeuger   Vernichter   ①   ②

$H_{hw}$  besteht aus 2 Prozessen:



Elektron im Zustand  $e$  wird vernichtet  
 Elektron im Zustand  $e'$  wird erzeugt

$$\frac{1}{1}$$

unter Erzeugung eines Schwingungsquant

unter Vernichtung eines Schwingungsquant

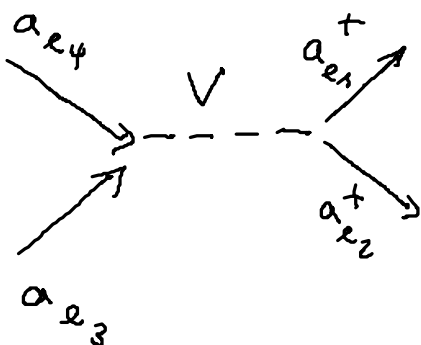
Bei Herleitung des elektromagnetischen H haben wir die Coulomb-WW weggelassen  $V_{el-el}$

in unsere Formel ein:

$$V_{el-el} = \frac{q^2}{4\pi\epsilon_0} \int d^3r \int d^3r' \frac{\psi^\dagger(\vec{r}) \psi^\dagger(\vec{r}') \psi(\vec{r}') \psi(\vec{r})}{|\vec{r} - \vec{r}'|}$$

in Modenentwicklung:  $\psi^\dagger = \sum_{e_i} a_{e_i}^\dagger \psi_{e_i}^*$ ,  $\psi = \sum_{e_i} \psi_{e_i} a_{e_i}$

$$= V_{e_1 e_2 e_3 e_4} a_{e_1}^\dagger a_{e_2}^\dagger a_{e_3} a_{e_4}$$



Die Coulomb WW ist also als Streuprozess

Zwischen 2 Elektronen die ihre Zustände bei  
der Streuung verändern anzusehen

„Verteilg. / Erzeugg.“  $\rightarrow$  bezieht sich auf die  
Quantenzahl der Elektronen