5.4. Quantisierung der Normalmoden

$$L = \frac{1}{2} \sum_\alpha \left(\dot{y}_\alpha^2 - \omega_\alpha^2 y_\alpha^2 \right), \quad y_\alpha : \text{Normalkoordinaten } y_\alpha = y_\alpha(t)$$

ergibt die Hamiltonfunktion von harmonischen Oszillatoren ($m_\alpha = 1$)

$$H = \frac{1}{2} \sum_\alpha \left(p_\alpha^2 + \omega_\alpha^2 y_\alpha^2 \right)$$

Quantisierung im Heisenbergbild analog harmonischem Oszill.

$$y_\alpha(t) = \left(\frac{\hbar}{2\omega_\alpha} \right)^{1/2} \left(b_\alpha^+(t) + b_\alpha(t) \right)$$

$$p_\alpha(t) = i \left(\frac{\hbar \omega_\alpha}{2} \right)^{1/2} \left(b_\alpha^+(t) - b_\alpha(t) \right)$$

Orte y_α und Impulse p_α genügen der „–" Quantisierung (Oszillator der QM), daher $[b_\alpha, b_{\alpha'}^+]_- = \delta_{\alpha,\alpha'}$

$$[b_\alpha^{(+)}, b_{\alpha'}^{(+)}]_- = 0$$

siehe QM I

einsetzen in $H = \sum_\alpha \hbar\omega_\alpha b_\alpha^+ b_\alpha$

Quanten der Normalschwingungen der Kerne werden

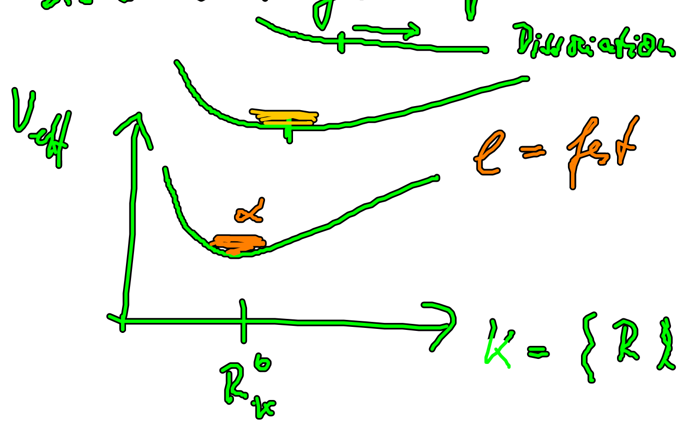
Phonone genannt. Analog zu Photonen kann man ähnliche Zustände konstruieren.

<u>Festkörper</u>: $\omega_\alpha \to \omega(\vec{k})$

Wellenzahlvektor

Auslenkung des k-ten <u>Kerns</u> in Richtung i: $\delta \underline{q_i}(k) = \frac{1}{\sqrt{m_k}} \sum_\alpha \underline{y_\alpha}(t)\, A_i^k(\omega_\alpha)$

bisher alles für 1 feste ℓ d.h. einen Elektronzustand



$$\boxed{\alpha \hat{=} \alpha, \ell}$$

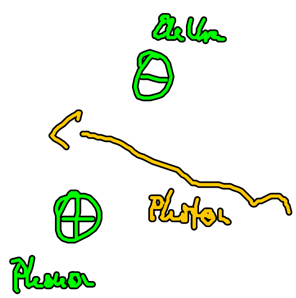
<u>IV</u> <u>Wechselwirkende Quantenfelder</u>:

<u>Elektron-Phonon und Elektron-Photon WW</u>

1. Stand und Observable

Elektronen mit Coulomb-WW
(effektive Orbitale) a^+_e, a_e

WW



WW

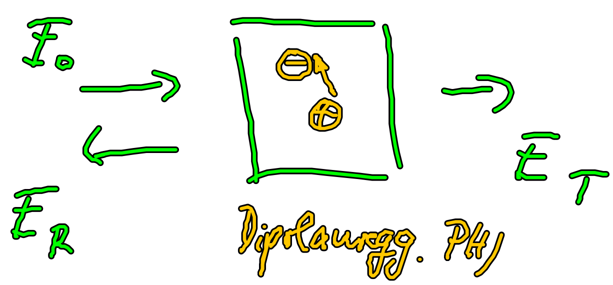
Phononen ohne interne WW
(in quadratischer Auslenkung, sonst WW)
b^+_α, b_α

Photonen ohne interne Wechselwirkung
(nichtrelativistisch)
c^+_k, c_k

WW

günstige Observable ? Elektronentransport oder Optik

a) Absorption : eingestrahltes Lichtfeld E_0



P(t) : Dipoldichte als Quelle der Maxwellgleichungen klassische Dipoldichte: $P(t) = n_0 \underbrace{\sum_i q \vec{r}_i(t)}_{\text{Summe aller Dipole (Elektronen) eines Atoms}}$

n_0: Anzahldichte der Atome $\left(\frac{\text{Zahl}}{m^3}\right)$

Quantisierung: $\underline{\vec{P}}(t) = n_0 \int d^3r\, \Psi^+(\vec{r}, t)\, q\vec{r}\, \Psi(\vec{r}, t)$

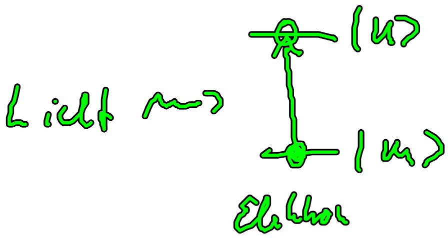
in Moden des elektronischen Felds $= n_0 \sum_{n,m} a_n^+(t)\, a_m(t)\, \vec{d}_{nm}$

$\Psi^+ = \sum_n \varphi_n^* a_n^+$

$$\vec{d}_{nm} = q \int d^3r\, \varphi_n^*(\vec{r})\, \vec{r}\, \varphi_m(\vec{r})$$

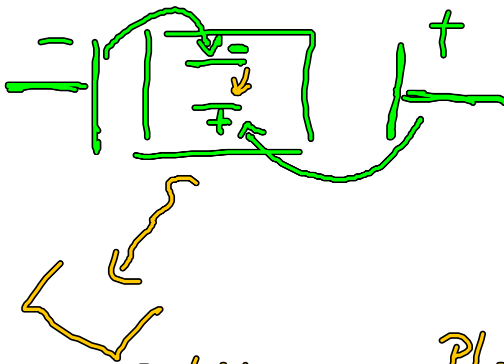
qm Dipolmoment (Zahl, kein Operator) sagt aus wie stark opt. Übergang ist

$$\boxed{\text{Dipoldichte d. } \langle a_n^+ a_m \rangle \text{ bestimmt.}}$$



in |n> erzeugt und
in |m> vernichtet
durch Licht

b) Lichtemission



Rekombination v. El-Loch Paare in Halbleiter / Isolatoren

↙ „Licht"

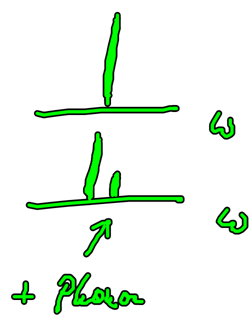
Detektor → Photonzahl: $n(t) = \sum_{\lambda k} c^+_{\lambda k}(t)\, c_{\lambda k}(t)$

λ, k: Lichtmoden

eigentlich wird $\dot{n}(t)$ (Rate) gemessen

Phänomene:

a) spektrale Absorption, Phononseitenbande,



Quantenbeats: Oszillation d. El. zwischen Zuständen

b) spontane Emission

nichtklassisches Licht g_2

Lambshift: Aufhebung v. Entartung d. WW mit Vakuumschwankungsfeld

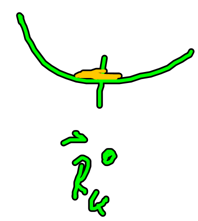
2. Wechselwirkung v. Elektronen und Phononen

2.1. Elektron - Kern WW

$$W_{el-K} = \sum_{i,K} W_{iK} = \sum_{iK} \frac{-Ze^2}{4\pi\varepsilon_0 \, |\vec{r}_i - \vec{R}_K|}$$

Wechselwirkungspotential El - Kern
(i) (K)

Born - Oppenheimer: $\vec{R}_K = \vec{R}_K^0 + \delta\vec{R}_K$



und effektive Potential

$$W_{el-K} \approx \underbrace{\sum_{iK} W_{iK}(\vec{r}_i - \vec{R}_K^0)}_{\text{Potential f. Elektronen } \vec{r}_i \text{ in festgehaltenen Kernen } \vec{R}_K^0} + \sum_{iK} \delta\vec{R}_K \cdot \nabla_{\vec{R}^0} W_{iK}(\vec{r}_i - \vec{R}_K^0)$$

$$\delta\vec{R}_K = \sum_i \delta q_i(K)\, \vec{e}_i$$

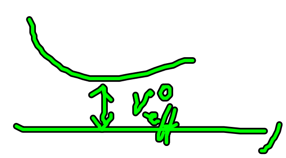
Einsetzen der Quantentheorie f. Phononen

$$= W^0_{el-k}(\vec{r}_i) + \sum_\alpha \left(b^+_{e\alpha} + b_{e\alpha}\right) \underbrace{\sum_{i,k} \left(\frac{\hbar}{2m(k)\,\omega_{e\alpha}}\right)^{1/2} \vec{A}^k(\omega_{e\alpha}) \cdot \vec{\nabla}_{R^0_k} W_{ik}}_{\equiv \sum_i \overline{W}_\alpha(\vec{r}_i)}$$

$$= W^0_{el-k}(\{\vec{r}_i\}) + \underbrace{\sum_\alpha \left(b^+_{e\alpha} + b_{e\alpha}\right) \sum_i \overline{W}_\alpha(\vec{r}_i)}_{W^{\delta\vec{R}}_{el-k}(\{\vec{r}_i\})}$$

Phonon sind quantisiert

2.2. Zweitquantisierung d. Hamiltonians von Atomverbänden unter Elektron-Phonon WW



$$H^{(1)} = \underbrace{T_{el} + V_{el-el} + W^0_{el-k}}_{\text{Elektronen in festgehaltenem Kernpotential}} + \underbrace{V^0_{eff} + H_{ph}}_{\text{Phononen, } V^0_{eff} = \text{Konstante}} + \underbrace{W^{\delta\vec{R}}_{el-k}}_{\text{Elektron-Phonon WW}}$$

$$\psi = \sum_e a_e(t)\, \varphi_e(\vec{r})$$

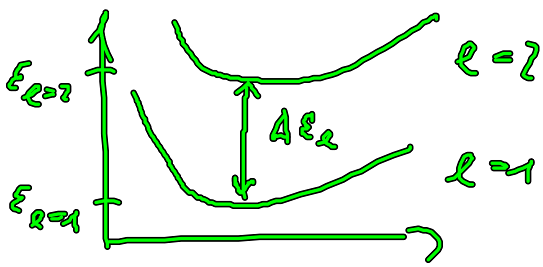
löst das elektronische Problem (effektive Orbitale l)

$$H^{(2)} = \sum_{l} \varepsilon_l \, a_l^+ a_l + \sum_{l,\alpha} \hbar\omega_{l\alpha} \, b_{l\alpha}^+ b_{l\alpha} + \sum_{ll'\alpha} \hbar g^{\alpha}_{ll'} \, a_{l'}^+ a_l \left(b_{l\alpha}^+ + b_{l\alpha}\right)$$

elektronische Einteilchenenergien

Phononenergie

El.-Ph.-WW Matrixelement



Vorfaktor $\cdot \, \overline{W}_{\alpha}(\vec r_i) \xrightarrow{\text{2. Quantisierg.}}$

Vorfaktor $\int d^3r \, \varphi^*_{l'}(\vec r) \, \overline{W}_{\alpha}(\vec r) \, \varphi_l(\vec r)$

i.a. $l \neq l'$

Hamiltonian setzt sich aus 3 Anteilen zusammen:

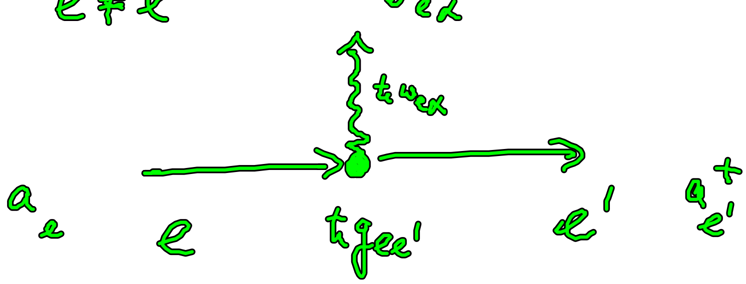
a) Elektron in Zuständen l

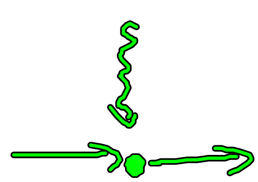
b) Phonon in – " – α, l

c) Elek.-Phonon kopplg.

1)

$l \neq l'$



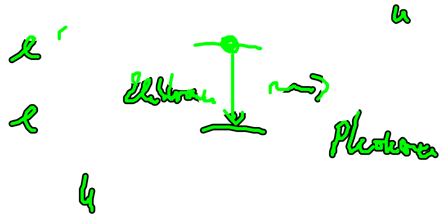


man erzeugt e', vernichtet e

unter Phonon emission

Phonon emission   Phonon absorption

beschreibt Übergänge zwischen elektronischen Niveaus



Energierelaxation

2. $e = e'$

WW bei der das Phononsystem den elektronischen Zustand nicht verändert aber dessen Phase

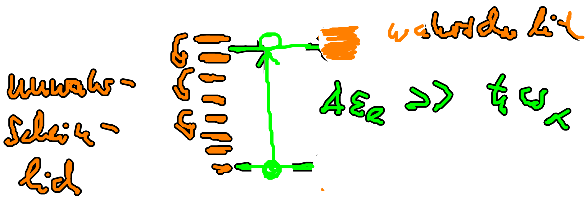
e —— $\leftarrow (b_\alpha^+ + b_\alpha)$ „wackelt am Niveau"

Phasenrelaxation

Energierelaxation nie ohne Phasenrelaxation

Phasenrelaxation ohne Energierelaxation möglich

typischerweise ist $e = e'$ in Moleküle dominant



$\Delta E_e \gg \hbar\omega_\alpha$

2.3. Renormierung d. QFT d. El-Ph. Kopplg.

$$H_{el-ph} = \sum_{ee'} \hbar g^{\alpha}_{ee'} a^+_{e'} a_e \left(b^+_{e\alpha} + b_{e\alpha}\right)$$

sollte kein El-Ph WW zeigen im Grundzustand

<u>Bsp</u> $e = e'$

$$\langle \dot{b}_\alpha \rangle = -i\omega_\alpha \langle b_\alpha \rangle - i \sum_e g^{\alpha}_{ee} \langle a^+_e a_e \rangle$$

endliche Zahl v. Elektron in GZ

Renormierung: neue Ruhelage

$$\tilde{b}_\alpha = b_\alpha + z_\alpha$$

Zahl die neue Ruhelage sicherstellt in der kein Kernbewg. induziert wird (z_α wird so gewählt)

f. Zwischenraumsystem Ergebnis!

$$H = \sum_{l=1}^{2} \tilde{\varepsilon}_l \, a_l^{\dagger} a_l + \sum_{\alpha} \hbar\omega_\alpha \, \tilde{b}_\alpha^{\dagger} \tilde{b}_\alpha - \underline{a_2^{\dagger} a_2} \sum_{\alpha} \tilde{g}_{\mathrm{eff}}^{\alpha} \left(\tilde{b}_\alpha^{\dagger} + \tilde{b}_\alpha \right)$$

renormierte Energie

$\tilde{\varepsilon} \to \varepsilon$ $\quad\quad$ $\tilde{b} \to b$