

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.

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

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

Orte y_{α} und Impulse p_{α} genügen der „-“ Quantisierung

(Oszillator des QM), daher $[b_{\alpha}, b_{\alpha'}^{\dagger}]_{-} = \delta_{\alpha, \alpha'}$

Siehe QM I

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

$$\text{einsetzen in } \underline{H} = \sum_{\alpha} \hbar\omega_{\alpha} b_{\alpha}^{\dagger} b_{\alpha}$$

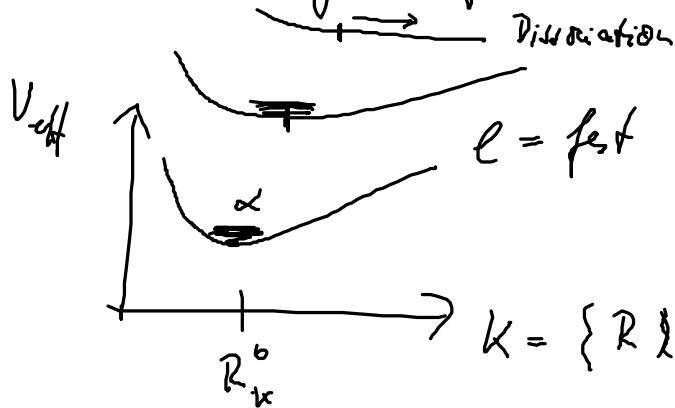
Quant der Normal Schwingungen der Kerne werden

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

Festkörper: $\omega_\alpha \rightarrow \omega(\vec{k})$
 \uparrow Wellenzahlvektor

Auslenkung $\underline{\delta q}_i(\vec{k}) = \frac{1}{\sqrt{M_k}} \sum_\alpha \underline{y}_\alpha(t) A_i^k(\omega_\alpha)$
 des k -ten Kerns in
 Richtung i

bisher alle für 1 feste l d.h. einen Elektronenzustand



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

IV Wechselwirkende Quantfelder:

Elektron - Phonon und Elektron - Photon WW

1. Zustand und Observable

Elektronen mit Coulomb-WW

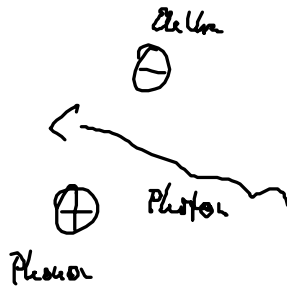
(effektive Orbitale e) $\begin{pmatrix} + \\ a_1 a_e \\ - \end{pmatrix}$

WW ↗

Phononen ohne interne WW

(in quadratischer Auslenkung, sonst WW)

$\begin{pmatrix} + \\ b_\alpha | b_\alpha \\ - \end{pmatrix}$



↖ WW

Photonen ohne interne Wechselwirkung (nichtrelativistisch)

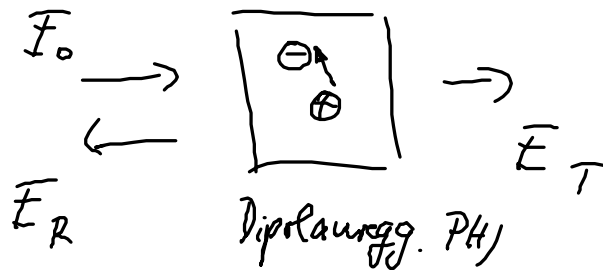
$\begin{pmatrix} + \\ c_n | c_n \\ - \end{pmatrix}$

↔ WW

günstige Observablen?

Elektronen transport oder Optik

a) Absorption : eingestrahktes Lichtfeld \vec{E}_0



$P(t)$: Dipoldichte als Quelle der Maxwellgleichungen

klassische Dipoldichte: $P(t) = n_0 \sum_i q \vec{r}_i(t)$

n_0 : Anzahl dichte
der Atome

$$\left(\frac{\text{Zahl}}{\text{m}^3} \right)$$

Summe aller Dipole (Elektronen)
eines Atoms

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

in Mode des
elektromagnetischen Felds

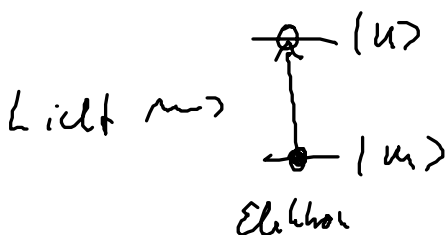
$$= n_0 \sum_{n,m} a_n^\dagger(t) a_m(t) \vec{d}_{nm}$$

$$\psi^\dagger = \sum_n \varphi_n^* a_n^\dagger$$

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

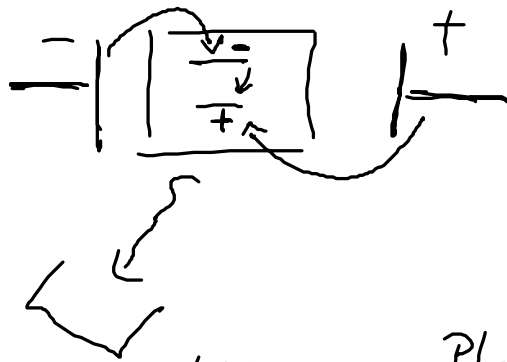
q_n Dipolmoment (Zahl, kein Operator)
sagt aus wie stark opt. Übergang ist

Dipoldichte d. $\langle a_n^\dagger a_m \rangle$ bestimmt.



in $|u\rangle$ erzeugt und
in $|m\rangle$ vernichtet
durch Licht

b) Lichtemission



Rekombination v. e^- -Loch Paare
in Halbleiter / Isolatoren
↳ „Licht“

Detektor \rightarrow Photonzahl: $n(t) = \sum_{\lambda, k} c_{\lambda, k}^{\dagger}(t) c_{\lambda, k}(t)$

λ, k : Lichtmode

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

Phänomene :

- a) spektrale Absorption, $\frac{1}{\omega}$
Photon seitwärts, $\frac{1}{\omega}$
+ Photon

Quantenbeob: Oszillation d. El. zwickel Zustände

b) Spontane Emission

nichtklassisch \leftarrow Licht g_2

Lambshift: Aufhebung v. Entartung d.

WW mit Vakuumstrahlungsfeld

2. Wechselwirkung v. Elektronen und Phononen

2.1. Elektron - Kern WW

$$W_{el-k} = \sum_{i,k} W_{ik} = \sum_{ik} \frac{-ze^2}{4\pi\epsilon_0 |\vec{r}_i - \vec{R}_k|}$$

Wechselwirkungs-
potential El - Kern
(i) (k)

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



und effektives Potential

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

Potential f. Elektronen \vec{r}_i
in festgehaltenen Kernen \vec{R}_k^0

$$\delta \vec{R}_k = \sum_i \delta q_i(k) \vec{e}_i$$

Einsetzen der Quantentheorie
f. Phononen



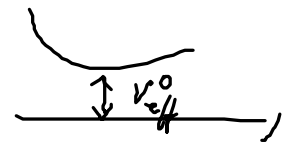
$$= W_{el-k}^0(\vec{r}_i) + \sum_{\alpha} (b_{e\alpha}^+ + b_{e\alpha}) \underbrace{\sum_{i,k} \left(\frac{t}{2m(k)w_{e\alpha}} \right)^{1/2} \vec{A}^k(w_{e\alpha}) \cdot \vec{p}_{pk} W_{ik}}_{\equiv \sum_i \bar{W}_{\alpha}(\vec{r}_i)}$$

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

Phonon sind quantisiert

2.2. Zweitquantisierung d. Hamiltonians von Atomverbänden

unter Elektron-Phonon WW



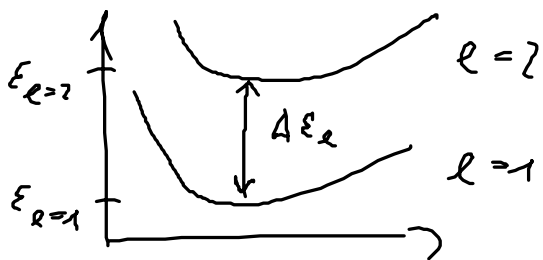
$$H^{(1)} = \underbrace{\underbrace{T_{el} + V_{el-el}}_{\text{Elektronen im festgehaltenen Kernpotential}} + W_{el-k}^0}_{\text{Elektronen im festgehaltenen Kernpotential}} + \underbrace{V_{eff}^0 + H_{pk}}_{\text{Phononen, } V_{eff}^0 = \text{Kohäsion}} + \underbrace{W_{el-k}^{\delta R}}_{\text{Elektron-Phonon WW}}$$

$$\psi = \sum_{\alpha} a_{\alpha} (+) \varphi_{\alpha}(\vec{r})$$

löst das elektromische
Problem (effektive Orbitale l)

$$H^{(2)} = \sum_e \epsilon_e a_e^\dagger a_e + \sum_{l,\alpha} \hbar \omega_{l,\alpha} b_{l,\alpha}^\dagger b_{l,\alpha} + \sum_{ee'} \sum_{\alpha} t_{gee'}^\alpha a_{e'}^\dagger a_e (b_{l,\alpha}^\dagger + b_{l,\alpha})$$

\uparrow elektronische Einheitsenergie
 \uparrow Phononenergie
 \uparrow EL-Ph.-WW Matrixelement



Vorgehen: $\overline{W}_\alpha(\vec{r}_i)$ $\xrightarrow{2. \text{ Ordnung}}$

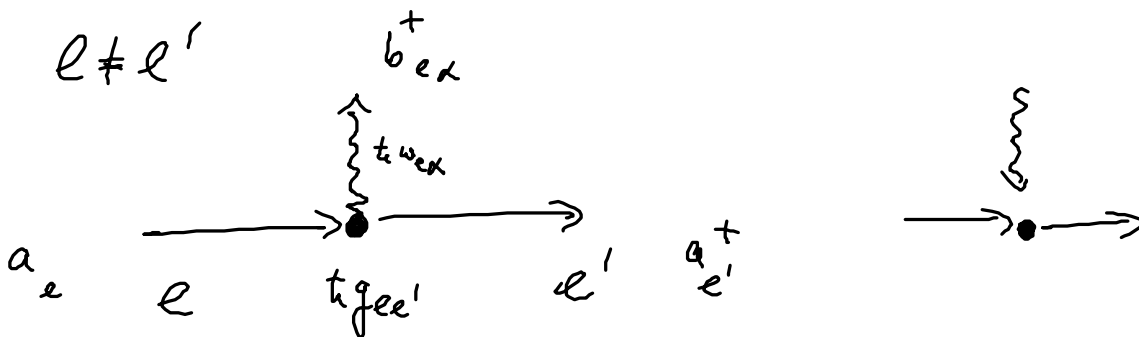
Vorgehen $\int d^3r \varphi_{e'}^\dagger(\vec{r}) \overline{W}_\alpha(\vec{r}) \varphi_e(\vec{r})$

i. a. $l \neq l'$

Hamiltonian setzt sich aus 3 Anteilen zusammen:

- a) Elektron in Zustände l
- b) Phonon in $-\alpha-$ α, l
- c) Elektron-Phonon-Kopplg.

1/



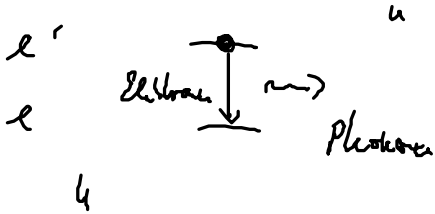
man erzeugt l' , vermittelt e

unter Phonon emission

Phonon emission

Phonon absorption

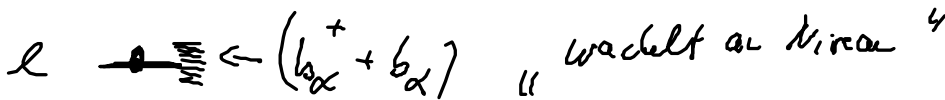
beschreibt Übergänge zwischen elektronische Niveaus



Energie relaxation

2. $l = l'$

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

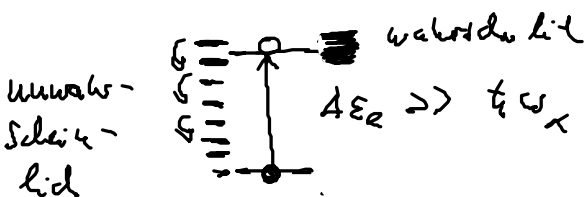


Phasen relaxation

Energie relaxation nie ohne Phasen relaxation

Phasen relaxation ohne Energie relaxation möglich

typischerweise ist $l = l'$ in Moleküle dominant



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

$$H_{el-ph} = \sum_{ee'} t_{gee'} g_{ee'}^{\times} a_{e'}^{\dagger} a_e (b_{e\alpha}^{\dagger} + b_{e\alpha})$$

sollte kein El-Ph WW züige im Grundzustand

Bsp $l=e'$

$$\langle b_{\alpha} \rangle = -i\omega_{\alpha} \langle b_{\alpha} \rangle - i \sum_e g_{ee}^{\times} \langle a_e^{\dagger} a_e \rangle$$

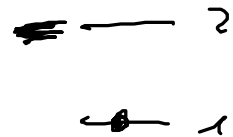
\uparrow
 Endliche Zahl v.
 Elektronen im GZ

Renormierung: neue Paulilage

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

\uparrow Zahl die
 neue Paulilage sich stellt in
 der kein Kernbewy. induziert wird
 (z_{α} wird so gewählt)

f. Zweiniveausystem Ergebnis!



$$H = \sum_{e=1}^2 \tilde{\varepsilon}_e a_e^\dagger a_e + \sum_{\alpha} \hbar \omega_{\alpha} \tilde{b}_{\alpha}^{\dagger} \tilde{b}_{\alpha} - \underline{a_2^\dagger a_2} \sum_{\alpha} \tilde{g}_{\alpha} (\tilde{b}_{\alpha}^{\dagger} + \tilde{b}_{\alpha})$$

↑
 renormierte Energie
 $\tilde{\varepsilon} \rightarrow \varepsilon$

$\tilde{b} \rightarrow b$