Anhang C

C.1 Quantisierung des klassischen elektromagnetischen Feldes

Wir wollen in diesem Anhang einen nicht kovarianten Zugang zur Feldquantisierung studieren und untersuchen hierzu die klassische Theorie der Elektrodynamik, welche durch die Maxwellschen Gleichungen beschrieben wird. Wir wollen hier das freie elektromagnetische Feld behandeln, es sind also keine Raumladungsdichten $\rho(\mathbf{r}, t)$ und Stromdichten $\mathbf{j}(\mathbf{r}, t)$ vorhanden. Wir arbeiten dann günstiger Weise in der Coulomb- oder Strahlungseichung:

$$\mathrm{div}\mathbf{A}(\mathbf{r}, t) = 0, \tag{C.1}$$

mit dem Vektorpotential $\mathbf{A}(\mathbf{r}, t)$. Das $\mathbf{B}$- und das $\mathbf{E}$-Feld ergeben sich dann durch:

$$\mathbf{B}(\mathbf{r}, t) = \mathrm{rot}\mathbf{A}(\mathbf{r}, \mathbf{t}), \qquad \mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = -\frac{\partial \mathbf{A}(\mathbf{r}, t)}{\partial t} \tag{C.2}$$

als Lösungen der Differentialgleichung

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial t^2} - \nabla^2\right) \mathbf{A}(\mathbf{r}, t) = 0. \tag{C.3}$$

Das $\mathbf{B}$- und das $\mathbf{E}$-Feld sind transversale Felder und die Lösungen von (C.3) sind die transversalen elektromagnetischen Wellen im freien Raum - sie bilden das *Strahlungsfeld*. Die Energie des Feldes ist durch

$$H_{\mathrm{rad}} = \frac{1}{2}\int d^3r \, \left(\mathbf{E}^2 + \mathbf{B}^2\right) \tag{C.4}$$

gegeben.

Will man nun die Theorie quantisieren, so wird man kanonisch konjugierte Koordinaten für jeden Freiheitsgrad einführen und sie dann Vertauschungsrelationen unterwerfen. Zu einem bestimmten Zeitpunkt t muß dann das Vektorpotential $\mathbf{A}$ in jedem Punkt $\mathbf{r}$ des Raumes spezifiziert sein. Von diesem Gesichtspunkt aus betrachtet hat das elektromagnetische Feld kontinuierlich unendlich viele Freiheitsgrade.

Man vereinfacht das Problem, indem man die Strahlung innerhalb eines großen Würfels der Kantenlänge L und vom Volumen $\Omega = L^3$ untersucht. Man unterwirft dann das Vektorpotential an der Oberfläche dieses Würfels periodischen Randbedingungen. Dann ist es möglich das Vektorpotential durch Fourierreihen darzustellen; das Vektorpotential ist somit durch einen abzählbaren Satz von Fourierkoeffizienten charakterisiert und das Feld wird nunmehr durch abzählbar unendlich viele Freiheitsgrade bestimmt. Die Fourieranalyse entspricht dem Auffinden der Normalschwingungen des Feldes, wobei jede solche Normalschwingung unabhängig von den anderen ist und durch einen harmonischen Oszillator beschrieben werden kann. Dies erlaubt die Quantisierung des Strahlungsfeldes durch Übernahme der Quantisierung des harmonischen Oszillators.

Die periodischen Randbedingungen für das Vektorpotential lauten:

$$\begin{aligned} \mathbf{A}(0,y,z,t) &= \mathbf{A}(L,y,z,t) \\ \mathbf{A}(x,0,z,t) &= \mathbf{A}(x,L,z,t) \\ \mathbf{A}(x,y,0,t) &= \mathbf{A}(x,y,L,t), \end{aligned} \tag{C.5}$$

und die Funktionen

$$\frac{1}{\sqrt{\Omega}}\mathbf{e}_r(\mathbf{k})e^{i\mathbf{kr}}; \quad r = 1,2 \tag{C.6}$$

bilden einen vollständigen Satz von transversalen, orthonormalen Vektorfeldern. Die Wellenvektoren sind dabei von folgender Form:

$$\mathbf{k} = \frac{2\pi}{L}(n_1, n_2, n_3); \qquad n_i = 0, \pm 1, \pm 2, \ldots \tag{C.7}$$

damit die Felder (C.6) die Randbedingungen (C.5) erfüllen. $\mathbf{e}_{1,2}(\mathbf{k})$ sind die *Polarisationsvektoren*; es sind dies zwei aufeinander senkrecht stehende Einheitsvektoren, welche zusätzlich noch auf $\mathbf{k}$ senkrecht stehen:

$$\left.\begin{aligned} \mathbf{e}_r(\mathbf{k}) \cdot \mathbf{e}_s(\mathbf{k}) &= \delta_{r,s} \\ \mathbf{e}_r(\mathbf{k}) \cdot \mathbf{k} &= 0. \end{aligned}\right\} \quad r,s = 1,2 \tag{C.8}$$

Die letzte Bedingung in (C.8) stellt sicher, daß die Felder (C.6) transversal sind, und daß sie die Coulombeichung (C.1) erfüllen. Durch diese Annahmen werden *linear polarisierte* Felder beschrieben. Nimmt man komplexe Linearkombinationen von $\mathbf{e}_1(\mathbf{k})$ und $\mathbf{e}_2(\mathbf{k})$, so erhält man *zirkular* oder *elliptisch polarisierte* Felder.

Wir entwickeln nun das Vektorpotential $\mathbf{A}(\mathbf{r},t)$ nach einer Fourierreihe:

$$\mathbf{A}(\mathbf{r},t) = \sum_{\mathbf{k},r} \underbrace{\left(\frac{1}{2\Omega\omega_{\mathbf{k}}}\right)^{\frac{1}{2}}}_{=N_{\mathbf{k}}} \mathbf{e}_r(\mathbf{k}) \left[a_r(\mathbf{k},t)\, e^{i\mathbf{kr}} + a_r^*(\mathbf{k},t)\, e^{-i\mathbf{kr}}\right], \tag{C.9}$$

mit $\omega_{\mathbf{k}} = |\mathbf{k}|$ als Lösungsbedingung für die Wellengleichung. Des weiteren ist durch (C.9) sichergestellt, daß $\mathbf{A}(\mathbf{r},t)$ reel ist ($\mathbf{A}(\mathbf{r},t) = \mathbf{A}^*(\mathbf{r},t)$). Weiters ist (C.9) eine Entwicklung, welche zu jedem Zeitpunkt t ausgeführt wird. Nachdem $\mathbf{A}(\mathbf{r},t)$ der Beziehung (C.3) gehorcht, folgt mit (C.9):

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial t^2} - \nabla^2\right) \mathbf{A}(\mathbf{r},t) = 0,$$

$$\sum_{\mathbf{k},r} N_{\mathbf{k}} \mathbf{e}_r(\mathbf{k}) \left(\frac{\partial^2}{\partial t^2} - \nabla^2\right) \left[a_r(\mathbf{k},t)\, e^{i\mathbf{kr}} + a_r^*(\mathbf{k},t)\, e^{-i\mathbf{kr}}\right] = 0.$$

Daraus folgt:

$$\begin{aligned}
\left(\frac{\partial^2}{\partial t^2} - \nabla^2\right) a_r(\mathbf{k},t)\, e^{i\mathbf{kr}} &= 0 \\
\frac{\partial^2}{\partial t^2} a_r(\mathbf{k},t)\, e^{i\mathbf{kr}} - a_r(\mathbf{k},t)\, (i\mathbf{k})^2\, e^{i\mathbf{kr}} &= 0 \\
\frac{\partial^2}{\partial t^2} a_r(\mathbf{k},t) + k^2 a_r(\mathbf{k},t) &= 0 \\
\frac{\partial^2}{\partial t^2} a_r(\mathbf{k},t) &= -\omega_{\mathbf{k}}^2 a_r(\mathbf{k},t).
\end{aligned} \tag{C.10}$$

Dies ist offensichtlich die Gleichung für einen harmonischen Oszillator und wir schreiben die Lösungen von (C.10) in der Form

$$a_r(\mathbf{k},t) = a_r(\mathbf{k}) e^{-i\omega_{\mathbf{k}} t}, \tag{C.11}$$

wobei die $a_r(\mathbf{k})$ die Amplituden zur Zeit $t = 0$ sind. Analoges gilt für die

$a_r^*(\mathbf{k})$. Wir können nun (C.4) umformen:

$$\begin{aligned}
\mathbf{E}(\mathbf{r},t) &= -\frac{\partial \mathbf{A}(\mathbf{r},t)}{\partial t} \qquad \text{(C.12)}\\
&= -\sum_{\mathbf{k},r} N_{\mathbf{k}} \mathbf{e}_r(\mathbf{k}) \left[e^{i\mathbf{kr}} \frac{\partial}{\partial t} a_r(\mathbf{k},t) + e^{-i\mathbf{kr}} \frac{\partial}{\partial t} a_r^*(\mathbf{k},t) \right]\\
E^2(\mathbf{r},t) &= \sum_{\mathbf{k},\mathbf{k}',r,r'} N_{\mathbf{k}} N_{\mathbf{k}'} \mathbf{e}_r(\mathbf{k}) \mathbf{e}_{r'}(\mathbf{k}') \left[e^{i\mathbf{kr}} \frac{\partial}{\partial t} a_r(\mathbf{k},t) + e^{-i\mathbf{kr}} \frac{\partial}{\partial t} a_r^*(\mathbf{k},t) \right] \qquad \text{(C.13)}\\
&\quad \times \left[e^{i\mathbf{k}'\mathbf{r}} \frac{\partial}{\partial t} a_{r'}(\mathbf{k}',t) + e^{-i\mathbf{k}'\mathbf{r}} \frac{\partial}{\partial t} a_{r'}^*(\mathbf{k}',t) \right]\\
&= \sum_{\mathbf{k},\mathbf{k}',r,r'} N_{\mathbf{k}} N_{\mathbf{k}'} \mathbf{e}_r(\mathbf{k}) \mathbf{e}_{r'}(\mathbf{k}') \left[e^{i(\mathbf{k}+\mathbf{k}')\mathbf{r}} \frac{\partial}{\partial t} a_r(\mathbf{k},t) \frac{\partial}{\partial t} a_{r'}^*(\mathbf{k}',t) \right.\\
&\quad + e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\mathbf{r}} \frac{\partial}{\partial t} a_r(\mathbf{k},t) \frac{\partial}{\partial t} a_{r'}^*(\mathbf{k}',t) + e^{-i(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\mathbf{r}} \frac{\partial}{\partial t} a_r^*(\mathbf{k},t) \frac{\partial}{\partial t} a_{r'}(\mathbf{k}',t)\\
&\quad \left. e^{-i(\mathbf{k}+\mathbf{k}')\mathbf{r}} \frac{\partial}{\partial t} a_r^*(\mathbf{k},t) \frac{\partial}{\partial t} a_{r'}(\mathbf{k}',t) \right]. \qquad \text{(C.14)}
\end{aligned}$$

Wir berechnen weiter:

$$\frac{1}{2} \int d^3r\, E^2(\mathbf{r},t) = \ldots$$

und untersuchen

$$I = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k},\mathbf{k}',r,r'} N_{\mathbf{k}} N_{\mathbf{k}'} \mathbf{e}_r(\mathbf{k})\, \mathbf{e}_{r'}(\mathbf{k}') \int d^3r\, e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\mathbf{r}} \frac{\partial}{\partial t} a_r(\mathbf{k},t) \frac{\partial}{\partial t} a_{r'}^*(\mathbf{k}',t).$$

Es gilt:

$$\int d^3r\, e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\mathbf{r}} = \begin{cases} 0 & \text{für} \quad \mathbf{k} \neq \mathbf{k}' \\ \Omega & \text{für} \quad \mathbf{k} = \mathbf{k}'. \end{cases}$$

Damit erhalten wir:

$$\begin{aligned}
I &= \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k},r,r'} \Omega N_{\mathbf{k}} N_{\mathbf{k}'} \underbrace{\mathbf{e}_r(\mathbf{k})\, \mathbf{e}_{r'}(\mathbf{k})}_{=\delta_{r,r'}} \frac{\partial}{\partial t} a_r(\mathbf{k},t) \frac{\partial}{\partial t} a_{r'}^*(\mathbf{k},t)\\
&= \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} \Omega N_{\mathbf{k}}^2 \left(-i\omega_k\right)^2 a_r(\mathbf{k}) a_r^*(\mathbf{k})\\
&= \frac{1}{4} \sum_{\mathbf{k},r} \omega_{\mathbf{k}} a_r^*(\mathbf{k}) a_r(\mathbf{k})
\end{aligned}$$

und ähnliches für die verbleibenden drei Terme von (C.14). Zusammengefaßt erhalten wir das Ergebnis:

$$H_{\mathrm{rad}} = \sum_{\mathbf{k},r} \omega_{\mathbf{k}} a_r^*(\mathbf{k})\, a_r(\mathbf{k}). \qquad \text{(C.15)}$$

Dieser Ausdruck ist zeitunabhängig wie bei Fehlen von Quellen zu erwarten war.

Die Ergebnisse für den harmonischen Oszillator können nun unmittelbar Anwendung finden, da (C.15) offensichtlich eine Hamiltonfunktion ist, welche aus der Überlagerung von unabhängigen harmonischen Oszillatoren - einen für jede Mode des elektromagnetischen Strahlungsfeldes - gebildet wurde. Wir führen also zur Quantisierung die Vertauschungsrelationen

$$\begin{aligned} \left[\hat{a}_r(\mathbf{k}), \hat{a}_s^\dagger(\mathbf{k}')\right] &= \delta_{r,s}\delta_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} \\ \left[\hat{a}_r(\mathbf{k}), \hat{a}_s(\mathbf{k}')\right] &= \left[\hat{a}_r^\dagger(\mathbf{k}), \hat{a}_s^\dagger(\mathbf{k}')\right] = 0 \end{aligned} \tag{C.16}$$

ein. Diese ergeben den zum Hamiltonoperator:

$$\hat{H}_{\mathrm{rad}} = \sum_{\mathbf{k},r} \omega_{\mathbf{k}} \left[\hat{a}_r^\dagger(\mathbf{k})\,\hat{a}_r(\mathbf{k}) + \frac{1}{2}\right]. \tag{C.17}$$

Man führt nun den Teilchenzahloperator

$$\hat{n}_r(\mathbf{k}) = \hat{a}_r^\dagger(\mathbf{k})\,\hat{a}_r(\mathbf{k}) \tag{C.18}$$

ein, welcher die Eigenwerte $n_r(\mathbf{k}) = 0, 1, 2, \ldots$ und die Eigenfunktionen

$$|n_r(\mathbf{k})\rangle = \frac{\left[\hat{a}_r^\dagger(\mathbf{k})\right]^{n_r(\mathbf{k})}}{\sqrt{n_r(\mathbf{k})!}}\,|0\rangle \tag{C.19}$$

hat, wie aus der Theorie des quantenmechanischen harmonischen Oszillators bekannt ist. $|0\rangle$ ist der Vakuumzustand, definiert als $\hat{a}_r(\mathbf{k})\,|0\rangle = |0\rangle$.

Die Eigenzustände des Hamiltonoperators (C.17) sind dann Produkte von Zuständen (C.19):

$$|\ldots, n_r(\mathbf{k}), \ldots\rangle = \prod_{\mathbf{k}_i, r_i} |n_{r_i}(\mathbf{k}_i)\rangle\,. \tag{C.20}$$

Diese Eigenzustände haben die Energie

$$\sum_{\mathbf{k},r} \omega_{\mathbf{k}} \left[n_r(\mathbf{k}) + \frac{1}{2}\right]. \tag{C.21}$$

Die Interpretation des Ergebnisses wird direkt vom quantenmechanischen harmonischen Oszillator übernommen: ein Operator $\hat{a}_r(\mathbf{k})$, welcher auf einen Zustand $|\ldots, n_r(\mathbf{k}), \ldots\rangle$ wirkt, reduziert die *Besetzungszahl* $n_r(\mathbf{k})$ dieses Zustandes um Eins, alle anderen Zustände bleiben unbeeinflußt. (Man sagt auch, daß die Zahl der Quanten $\omega_{\mathbf{k}}$ um Eins verringert wurde, oder daß ein Quant $\omega_{\mathbf{k}}$ vernichtet wurde. Ergo: $\hat{a}_r(\mathbf{k})$ ist ein *Vernichtungsoperator.*) Es gilt also:

$$\hat{a}_r(\mathbf{k})\,|\ldots, n_r(\mathbf{k}), \ldots\rangle = \frac{1}{\sqrt{n_r(\mathbf{k})}}\,|\ldots, n_r(\mathbf{k}) - 1, \ldots\rangle\,, \tag{C.22}$$

und die Energie wurde um das Quant $\omega_{\mathbf{k}} = |\mathbf{k}|$ verringert. Genauso wird durch die Wirkung von $\hat{a}_r^\dagger(\mathbf{k})$ auf den Zustand $|\ldots, n_r(\mathbf{k}), \ldots\rangle$ ein neuer Zustand erzeugt, welcher eine um $\omega_{\mathbf{k}}$ erhöhte Energie aufweist. Bezeichnet man nun das Quant $\omega_{\mathbf{k}}$ als ein *Photon* der Wellenzahl $\mathbf{k}$, so sind dann $\hat{a}_r(\mathbf{k})$ und $\hat{a}_r^\dagger(\mathbf{k})$ als *Vernichtungs-* bzw. *Erzeugungsoperatoren* von Photonen der Wellenzahl $\mathbf{k}$ und der Polarisation r anzusehen.

Der Zustand niedrigster Energie des Strahlungsfeldes ist der Vakuumzustand $|0\rangle$. In diesem sind alle Besetzungszahlen $n_r(\mathbf{k})$ gleich Null. Damit hat dieser Zustand immer noch die Energie

$$E_0 = \frac{1}{2}\sum_{\mathbf{k},r}\omega_{\mathbf{k}},$$

eine Konstante vom Wert Unendlich, welche aber nicht von physikalischer Relevanz ist. Man verschiebt daher die Energieskala derart, daß der Nullpunkt mit der Energie des Vakuumzustandes zusammenfällt. Der Hamiltonoperator (C.17) wird dann durch

$$\hat{H}_{\mathrm{rad}} = \sum_{\mathbf{k},r}\omega_{\mathbf{k}}\hat{a}_r^\dagger(\mathbf{k})\,\hat{a}_r(\mathbf{k}), \tag{C.23}$$

ersetzt.

Eine Darstellung in den Zuständen (C.20) nennt man auch die *Besetzungszahldarstellung.* Sie ist von großem Vorteil bei der Berechnung von Übergangswahrscheinlichkeiten. Schließlich ist noch festzustellen, daß aufgrund der Tatsache, daß die Eigenwerte von $\hat{n}_r(\mathbf{k})$ alle positiven ganzen Werte umfassen, die Photonen der Bose-Einstein Statistik genügen, es sind also *Bosonen.*

Aufgrund der hier durchgeführten Quantisierung sind nunmehr auch das Vektorpotential als auch das $\mathbf{E}$- bzw. $\mathbf{B}$-Feld Operatoren. Wir erhalten etwa für das Vektorpotential:

$$\hat{\mathbf{A}}(\mathbf{r}, t) = \hat{\mathbf{A}}^+(\mathbf{r}, t) + \hat{\mathbf{A}}^-(\mathbf{r}, t), \tag{C.24}$$

mit

$$\begin{aligned}
\hat{\mathbf{A}}^+(\mathbf{r}, t) &= \sum_{\mathbf{k},r} N_{\mathbf{k}}\mathbf{e}_r(\mathbf{k})\hat{a}_r(\mathbf{k})e^{i(\mathbf{kr}-\omega_{\mathbf{k}}t)} \\
\hat{\mathbf{A}}^-(\mathbf{r}, t) &= \sum_{\mathbf{k},r} N_{\mathbf{k}}\mathbf{e}_r(\mathbf{k})\hat{a}_r^\dagger(\mathbf{k})e^{-i(\mathbf{kr}-\omega_{\mathbf{k}}t)}.
\end{aligned}$$

Man bezeichnet $\hat{\mathbf{A}}^+(\mathbf{r},t)$ und $\hat{\mathbf{A}}^-(\mathbf{r},t)$ als die positiven und negativen Frequenzanteile des Operators $\hat{\mathbf{A}}(\mathbf{r},t)$. Die Operatoren $\hat{\mathbf{E}}^+(\mathbf{r},t)$ und $\hat{\mathbf{B}}^+(\mathbf{r},t)$ kann man aus (C.24) unmittelbar bestimmen. Es gibt aber einen ganz wesentlichen Unterschied zwischen Quantenfeldtheorie und Quantenmechanik. In ersterer sind die Amplituden (und damit die Felder) die Operatoren und die Orts- und Zeitkoordinaten sind Parameter der Theorie, in letzterer hingegen werden die Ortskoordinaten durch den Ortsoperator ersetzt, und nur die Zeit bleibt ein Parameter der Theorie.

Abschließend ist noch festzustellen, daß ein Zustand mit einer gegebenen Zahl ν von Photonen - also ein Eigenzustand des Teilchenzahloperators - kein klassisches Feld ergeben kann, selbst wenn $\nu \to \infty$ gilt. Dies folgt aus der Tatsache, daß $\hat{\mathbf{E}}$, so wie $\hat{\mathbf{A}}$, in den Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren linear ist. Der Erwartungswert von $\hat{\mathbf{E}}$ verschwindet somit, wenn er über solche Zustände gebildet wird. Es ist aber möglich *kohärente Zustände* $|c\rangle$ zu bilden, für welche $\left\langle c \middle| \hat{\mathbf{E}} \middle| c \right\rangle$ eine Transversalwelle ergeben, und für welche die relative Fluktuation $\Delta E / \left\langle c \middle| \hat{\mathbf{E}} \middle| c \right\rangle$ zu Null wird, wenn die Zahl der besetzten Photonenzustände $\left\langle c \middle| \hat{N} \middle| c \right\rangle$ gegen Unendlich geht. In diesem Fall geht das Feld sogar in den klassischen Zustand über.