



# QED in Periodic and Lossy Media/ QED in periodischen und absorbierenden Medien

*Diploma Thesis*

Cand. phys. Andreas Kurcz\*  
*Institute of Physics, University of Potsdam*

*Censors:*

Dr. Carsten Henkel and Prof. Dr. Martin Wilkens  
*Quantum Optics Group at the University of Potsdam,  
Institute of Physics, Neues Palais 10, 14469 Potsdam, Germany*

A canonical scheme based on the phenomenological Maxwell equations in the presence of dielectric matter is used to quantize the electromagnetic field in a periodic and lossy linear dielectric. We focus on a one-dimensional model of point scatterers with given frequency-dependent complex permittivity, and construct an expansion of the field operators that is based on the Green function and preserves the canonical equal-time commutation relations. Translation symmetry is secured by working with an infinite lattice. The impact of absorption is examined using the local density of states and the decay rate of a phase-coherent dipole chain located inside the structure. Incidentally the model is used to bring about a geometrical interpretation of the reflection from multilayers.

---

\*Electronic address: [kurcz@rz.uni-potsdam.de](mailto:kurcz@rz.uni-potsdam.de)

This work is licensed under a Creative Commons License:  
Attribution - Noncommercial - Share Alike 3.0 Germany  
To view a copy of this license visit  
<http://creativecommons.org/licenses/by-nc-sa/3.0/de/deed.en>

Published online at the  
Institutional Repository of the University of Potsdam:  
URL <http://opus.kobv.de/ubp/volltexte/2009/3528/>  
URN <urn:nbn:de:kobv:517-opus-35280>  
[<http://nbn-resolving.org/urn:nbn:de:kobv:517-opus-35280>]

Inhalt	9. Zusammenfassung	63	
<b>1. Einleitung</b>	5	<b>Danksagung</b>	63
<b>2. Feldquantisierung</b>	7	<b>A. Anhang zu 2</b>	64
2.1. Prinzipien der klassischen Elektrodynamik	7	Der Hauptwert $\mathcal{P}\left(\frac{1}{x}\right)$	64
2.2. Dispersions- und absorptionsfreie Medien	8	Überprüfen der Lösung (2.53)	64
2.3. Dispersive und absorptive Medien	9	<b>B. Anhang zu 4</b>	65
2.4. Skalenverhalten	11	Reflexionskoeffizienten für den Halbraum	65
2.5. Lineare, homogene Medien	11	<b>C. Anhang zu 6</b>	68
<b>3. Die photonische Bandstruktur</b>	14	Distributionen und andere Dinge	68
3.1. Das BLOCH-Theorem	14	Zum Dissipations-Fluktuations-Theorem	69
3.2. Absorptionsfreie Medien	15	Normierung der Modenfunktionen	71
3.3. Absorptive Medien	16	<b>D. Anhang zu 8</b>	73
<b>4. T-Matrix Formalismus</b>	18	Berechnung der Zerfallsrate einer Dipolkette	73
4.1. Felder in eindimensionalen, verlustfreien Systemen	18	<b>Literatur</b>	77
4.2. Transfermatrizen als Untergruppe in $SU(1,1)$	20		
4.3. Die Gruppe diskreter Translationen	22		
4.4. Streuamplituden im Einheitskreis	23		
<b>5. Der <math>\delta</math>-Streuer</b>	26		
5.1. Die Bandstruktur im Punktstreuermodell	26		
5.2. Der Halbraum aus periodisch angeordneten Punktstreuern	28		
5.3. Zum Punktstreuer und der Potentialschwelle	29		
<b>6. QED im periodischen Punktstreuermodell</b>	32		
6.1. Das quantisierte Strahlungsfeld	32		
6.1.1. Die klassische Modenentwicklung	32		
6.1.2. Quantisierung mit Hilfe der phänomenologischen MAXWELL-Gleichungen	34		
6.2. Bestimmung der GREENs-Funktion	36		
6.2.1. Das Lokalfeld einer Punktquelle	37		
6.2.2. Fortsetzung in den Halbraum	39		
6.3. Das freie Strahlungsfeld als Grenzfall	40		
6.4. Modenzerlegung	42		
6.4.1. Zur Modenfunktion	42		
6.4.2. Erzeuger und Vernichter in der Quasinäherung	43		
6.4.3. Gleichzeitige, fundamentale Vertauschungsrelation	45		
<b>7. Spontaner Zerfall</b>	47		
7.1. Das JAYNES-CUMMINGS-PAUL-Modell	47		
7.2. FERMIs Goldene Regel	48		
7.2.1. Zur Vakuumzerfallsrate	52		
7.3. Die lokale Zustandsdichtefunktion	52		
7.3.1. Zur Feldkorrelationsfunktion	52		
7.3.2. Lokale Minima und Maxima	55		
7.4. Absorptionsfreier Zerfall	55		
7.4.1. Die integrierte Zustandsdichte	56		
<b>8. Die Bandstruktur und Absorption</b>	58		
8.1. Komplexe Frequenzen und Kristallimpulse	58		
8.2. Zerfallsrate einer Dipolkette	59		



## 1. EINLEITUNG

Ist der Brechungsindex in den dazu periodisch angeordneten Strukturen translationsinvariant, spricht man allgemein von photonischen Kristallen. Die Variation des Brechungsindex selbst wird durch Kombination von mindestens zwei verschiedenen Materialien mit einem unterschiedlichen Brechungsindex erreicht. Variiert der Brechungsindex periodisch in verschiedene Raumrichtungen, unterscheidet man  $1D$ -,  $2D$ - und  $3D$ -photonische Kristalle.  $1D$ -photonische Kristalle stellen dabei eine Schichtfolge aus zwei Materialien mit verschiedenem Brechungsindex dar. Aufgrund der Brechungsindexvariation in der Struktur werden auf den photonischen Kristall auftreffende elektromagnetische Wellen gestreut. Man ist immer dann in der Lage dem periodischen Medium einen effektiven Brechungsindex zuzuweisen, solange die Wellenlänge aus einem bestimmten Spektralbereich der elektromagnetischen Strahlung um ein Vielfaches größer ist als die der Gitterkonstante. Liegt die Wellenlänge jedoch in der Nähe der Gitterkonstante, kommt es ähnlich wie bei der Röntgenbeugung an aus Atomen aufgebauten Kristallen zur konstruktiven Interferenz der Streuwellen, die von den parallelen Gitterebenen des photonischen Kristalls ausgesandt werden und allgemein als BRAGG-Streuung bezeichnet wird. Für diesen Fall ist der photonische Kristall daher immer als eine Art Gitter für Photonen zu verstehen und wird im eindimensionalen Fall auch gerne als Multilayer- oder BRAGG-Spiegel bezeichnet.

Ziel dieser Arbeit ist es, grundlegende Eigenschaften von  $1D$ -photonischen Kristallen mit Hilfe eines einfachen Modells aus  $\infty$ -periodisch<sup>1</sup> angeordneten Punktstreuern zu untersuchen und gegebenenfalls zu bestätigen. Dabei reduziert sich die Aufgabe auf die Lösung einer Wellen- bzw. HELMHOLTZ-Gleichung. Im allgemeinen stellt dies selbst im eindimensionalen Fall kein triviales Problem dar, da es nur für eine kleine Klasse von räumlichen Abhängigkeiten des Brechungsindex analytisch lösbar wird.

Um der Kausalitätsforderung durch die KRAMERS-KRONIG-Relationen näher zu kommen, soll der Struktur neben den allgemein immer vorhandenen dispersiven Eigenschaften ein zusätzliches Absorptionsvermögen erlaubt werden. Absorption wirft ein grundsätzliches Problem auf, da nach dem speziellen Quantisierungsverfahren nach KNÖLL, SCHEEL und WELSCH [KW98] explizit Rauschquellen mit berücksichtigt werden müssen. Bisher hat das Verfahren noch keine Anwendung auf periodische und absorbierende Strukturen gefunden. Es wird insbesondere untersucht, was unter Einschalten von Absorption mit der Bandstruktur geschieht. Dazu soll sich des

---

<sup>1</sup> Im Folgenden wird oft von  $\infty$ -periodischen Systemen gesprochen werden. Dabei ist unter einer  $\infty$ -periodischen Anordnung stets eine Anordnung mit unendlich vielen Perioden zu verstehen und nicht etwa eine Anordnung mit einer unendlichen Periode.

spontanen Zerfalls von Zwei-Niveau-Systemen als Sonde für die Quantenfluktuationen des Feldes in dem absorbierenden photonischen Gitter bedient werden. Die Arbeit ist in sieben Kapitel gegliedert.

In Abschnitt 2 werden zwei Verfahren zur Feldquantisierung vorgestellt. Zum einen wird ein Ausblick auf das Standardverfahren der Modenzerlegung gegeben und zum anderen das Quantisierungsschema nach KNÖLL, SCHEEL und WELSCH eingeführt. Ein wichtiges Hilfsmittel ist dabei die Elektrodynamik in homogenen Dielektrika.

Im Abschnitt 3 soll dann ergänzend der Frage nach dem Ursprung der sich aus der Periodizität ergebenden photonischen Bandstruktur nachgegangen werden. Dabei soll das elektromagnetische Feld an die Stelle des SCHRÖDINGERSchen Materiefeldes der Quantenmechanik treten und daraus, ähnlich den Elektronen im Festkörper, Rückschlüsse auf die erlaubten Feldmoden gezogen werden. Dazu soll von der Translationsinvarianz der unendlich ausgedehnten, periodischen Struktur Gebrauch gemacht werden.

In Abschnitt 4 wird in Vorbereitung auf die Lösung der Wellengleichung die eindimensionale Streutheorie diskutiert. Der Formalismus dazu wird allgemein eingeführt. Eine wesentliche Motivation ist die geometrische Interpretation des Reflexionskoeffizienten den BOEDECKER und HENKEL [BH03] für einen unendlich ausgedehnten Halbraum aus Punktstreuern ermittelt haben. Dazu wird von der Klassifizierung der Untergruppen der Transfermatrizen nach YONTE, MONZON und SANCHEZ-SOTO [YMSS<sup>+</sup>02], [YMSS01] Gebrauch gemacht.

Mit den daraus gewonnenen Klassifizierungen zur Unterscheidung der einzelnen Merkmale von periodischen Systemen kann in Abschnitt 5 der eigentlich hier verwendete Punkt- oder  $\delta$ -Streuer eingeführt werden. Das Quantisierungsschema nach KNÖLL, SCHEEL und WELSCH ist nicht direkt auf einen Punktstreuer anwendbar, daher müssen zusätzliche technische Details geklärt werden.

Mit den gemachten Vorbetrachtungen erfolgt in Abschnitt 6 dann direkt die Quantisierung des Strahlungsfeldes auf der Basis des periodischen Punktstreuermodells. Dazu muß zunächst das Strahlungsfeld einer Punktquelle auf einem Punktstreuer ermittelt werden und die so gewonnene GREENs-Funktion des Problems mit Hilfe des Formalismus aus Abschnitt 4 auf das gesamte zu betrachtende Gebiet fortgesetzt werden. Dem in Abschnitt 2 vorgestellten Quantisierungsschema soll dabei das bereits vom freien Strahlungsfeld bekannte Prinzip der Modenzerlegung gegenübergestellt werden.

Die Manipulation der Vakuumfluktuationen beeinflusst den spontanen Zerfall in einer entsprechenden Umgebung. Das in Abschnitt 6 quantisierte Strahlungsfeld bietet in Abschnitt 7 nun eine interessante Möglichkeit den Zerfall von Zwei-Niveau-Systemen zu untersuchen und auf den Einfluß der Vakuumfluktuationen in einer solchen periodischen, absorptiven Umgebung aus Punktstreuern näher einzugehen.

Abschließend soll in Abschnitt 8 auf die Verände-

zung der Bandstruktur bei vorhandener Absorption der Punktstreuer eingegangen werden. Im Fall von Absorption werden die Kristallimpulse komplex. Die Bandstruktur läßt keine eindeutige Interpretation mehr zu. Jedoch kann mit Hilfe von FERMI's Goldener Regel die Zerfallsrate einer phasenkohärenten Kette von Dipolen bestimmt werden und daraus indirekt auf die erforderliche Information zur Bandstruktur geschlossen werden.

## 2. FELDQUANTISIERUNG

Wechselwirkungen von Licht mit Materie setzen immer die Anwesenheit dielektrischer, meist passiver Hintergrundmedien voraus. Allgemein können dies neben Resonatoren bzw. Spiegeln auch Strahlteiler, Blenden und Linsen sein. Die Anwesenheit solcher makroskopischen Körper und ihre Wirkung auf die Felder muß natürlich in einer quantentheoretischen Beschreibung mitberücksichtigt werden. Die Quantisierung des freien elektromagnetischen Feldes mit einem Vakuumhintergrund muß also um ein Feld mit einem materiell inhomogenen Hintergrund erweitert werden. Dabei sind Randbedingungen für die Tangentialkomponente des elektrischen Feldes und die Normalkomponente des Magnetfeldes,

$$\epsilon(\vec{r})^{\parallel} \cdot \vec{A}(\vec{r}, t) = 0 ,$$

$$\epsilon(\vec{r})^{\perp} \cdot \left( \vec{\nabla} \times \vec{A}(\vec{r}, t) \right) = 0 ,$$

die man im herkömmlichen Modenkzept zur Charakterisierung einer Resonatoranordnung verwendet, nur bedingt möglich bzw. sinnvoll.

Das mikroskopische Modell zur kanonischen Quantisierung ist das HOPFIELD-Modell [KW98], bei dem die Polarisation des Dielektrikums durch eine diskrete Anzahl harmonischer Oszillatoren beschrieben wird, die ihrerseits an ein Reservoir, das aus einem Kontinuum weiterer harmonischer Oszillatoren besteht, gekoppelt werden. Der Vorteil in diesem Modell liegt in der direkten Einführung der Polarisierbarkeit  $\alpha(\omega)$  als Kopplungskonstante einer linearen Kopplung zwischen Feld und Medium,

$$L_{\text{int}} = - \sum_{i=1}^N \alpha(\omega_i) \left( \vec{A}(\vec{r}, \omega) \dot{\vec{X}}(\vec{r}, \omega_i) + U \vec{\nabla} \vec{X}(\vec{r}, \omega_i) \right) .$$

( $U$  skalares Potential,  $\vec{X}(\vec{r}, \omega_i)$  Polarisationsfelder)

Die Bewegungsgleichungen, also die MAXWELL-Gleichungen, die sich aus dem entsprechenden Formalismus zur LAGRANGE- und HAMILTONdichte ergeben müssen, verknüpfen die mikroskopische Polarisierbarkeit mit den entsprechenden makroskopischen Größen. Mit dem Quantisierungsschema von HUTTNER und BARNETT [HB92] erfolgt dann erneut der Zugang über die kanonisch konjugierten Variablen der Theorie.

Die Felder oder Observablen können aber auch *direkt* in den Bewegungsgleichungen quantisiert werden [KW98], [GW96a], wenn man die Dielektrizitätsfunktion  $\epsilon(\vec{r}, \omega)$  als makroskopische Eigenschaft des Mediums vorgibt. Dieses Verfahren ist wesentlich pragmatischer, da man hier die dynamischen Freiheitsgrade phänomenologisch einführen kann und es erlaubt noch einmal einige wesentliche Punkte der klassischen Elektrodynamik hervorzuheben. Folgt man dem Schema von HUTTNER und BARNETT, müssen diese Freiheitsgrade durch aufwendige Diagonalisierungsverfahren erst noch gefunden werden, was im Vergleich zum Folgenden eine weitaus größere Herausforderung darstellt.

## 2.1. Prinzipien der klassischen Elektrodynamik

Im Prinzip ist mikroskopisch immer eine Behandlung der Hintergrundmedien möglich, indem man die entsprechenden Ladungen und Ströme in den MAXWELL-Gleichungen explizit mit berücksichtigt. Aber schon in der klassischen Elektrodynamik treten anstelle der mikroskopischen MAXWELL-Gleichungen phänomenologische, makroskopische Gleichungen, in denen der Einfluß von Hintergrundmedien durch Polarisations- und Magnetisierungsfelder sowie entsprechende Materialgleichungen erfaßt wird. Für das elektromagnetische Feld auf einem allgemein dielektrischen Hintergrund ohne zusätzliche Ladungen und Ströme sind die phänomenologischen MAXWELL-Gleichungen in ihrer üblichen Form bekannt [Jac02]:

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{B}(\vec{r}, t) = 0 , \quad (2.1)$$

$$\vec{\nabla} \times \vec{E}(\vec{r}, t) = -\dot{\vec{B}}(\vec{r}, t) , \quad (2.2)$$

$$\vec{\nabla} \cdot \left( \vec{E}(\vec{r}, t) + \frac{1}{\epsilon_0} \vec{P}(\vec{r}, t) \right) = 0 , \quad (2.3)$$

$$\vec{\nabla} \times \vec{B} = \frac{1}{c^2} \left( \dot{\vec{E}}(\vec{r}, t) + \frac{1}{\epsilon_0} \dot{\vec{P}}(\vec{r}, t) \right) , \quad (2.4)$$

wobei für lineare, isotrope Medien ohne räumliche Dispersion lokal ein kausaler Zusammenhang zwischen elektrischem Feld und Polarisationsfeld angenommen wird:

$$\vec{P}(\vec{r}, t) = \epsilon_0 \int_0^{\infty} d\tau \chi(\vec{r}, \tau) \vec{E}(\vec{r}, t - \tau) . \quad (2.5)$$

Die Ortsabhängigkeit der Suszeptibilität  $\chi(\vec{r}, \tau)$  spiegelt die Inhomogenität des Mediums wieder, d.h. die räumliche Anordnung der im konkreten Fall zu betrachtenden dielektrischen Körper. Für anisotrope Körper ist die Suszeptibilität, die hier die Aufgabe des kausalen Integral-kerns erfüllt, ein Tensor. Für nichtlineare Medien werden höhere Ordnungen bzw. Tensoren höherer Stufen benötigt, in denen die Symmetrie des Mediums, wenn vorhanden, wiederzufinden sein muß.

Geht man bezüglich der Zeit in den FOURIER-Raum über,

$$\vec{E}(\vec{r}, t) = \int_0^{\infty} d\omega \vec{E}(\vec{r}, \omega) e^{-i\omega t} + \text{c. c.} , \quad (2.6)$$

$$\vec{B}(\vec{r}, t) = \int_0^{\infty} d\omega \vec{B}(\vec{r}, \omega) e^{-i\omega t} + \text{c. c.} , \quad (2.7)$$

so erhält man aus (2.1), (2.2), (2.3) und (2.4):

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{B}(\vec{r}, \omega) = 0 , \quad (2.8)$$

$$\vec{\nabla} \times \vec{\mathcal{E}}(\vec{r}, \omega) = i\omega \vec{\mathcal{B}}(\vec{r}, \omega) , \quad (2.9)$$

$$\vec{\nabla} \cdot \epsilon(\vec{r}, \omega) \vec{\mathcal{E}}(\vec{r}, \omega) = 0 , \quad (2.10)$$

$$\vec{\nabla} \times \vec{\mathcal{B}}(\vec{r}, \omega) = -i \frac{\omega}{c^2} \epsilon(\vec{r}, \omega) \vec{\mathcal{E}}(\vec{r}, \omega) , \quad (2.11)$$

wobei

$$\epsilon(\vec{r}, \omega) = 1 + \int_0^\infty d\tau e^{i\omega\tau} \chi(\vec{r}, \tau) \quad (2.12)$$

die relative Dielektrizitätsfunktion ist. Da  $\chi(\vec{r}, \tau)$  eine kausale Funktion ist,

$$\chi(\vec{r}, \tau) = 0 \quad , \quad \tau < 0 ,$$

die als Integralkern reell ist, muß  $\epsilon(\vec{r}, \omega)$  eine holomorphe Funktion in der oberen Halbebene ( $\Im(\omega) > 0$ ) sein und es gilt nach (2.5) für die FOURIER-Transformierte:

$$\epsilon^*(\vec{r}, \omega) = \epsilon(\vec{r}, -\omega) . \quad (2.13)$$

Nach dem CAUCHYSchen Integralsatz folgt mit entsprechendem Integrationsweg, der die Singularität in der unteren Halbebene vermeidet:

$$\epsilon(\vec{r}, \omega) - 1 = -\frac{i}{2\pi} \int d\tilde{\omega} \frac{\epsilon(\vec{r}, \tilde{\omega}) - 1}{(\tilde{\omega} - \omega) - i\varepsilon} ,$$

woraus mit Hilfe der DIRAC-Identität (A3) folgt:

$$\epsilon(\vec{r}, \omega) - 1 = -\frac{i}{\pi} \mathcal{P} \int d\tilde{\omega} \frac{\epsilon(\vec{r}, \tilde{\omega}) - 1}{(\tilde{\omega} - \omega)} . \quad (2.14)$$

( $\mathcal{P}$  Hauptwertintegral, siehe A)

Für jedes  $\vec{r}$  ist  $\epsilon(\vec{r}, \omega)$  eine komplexwertige, holomorphe Funktion von  $\omega$  in der oberen Halbebene, die nach (2.14) den sogenannten KRAMERS-KRONIG-Beziehungen,

$$\Re[\epsilon(\vec{r}, \omega)] - 1 = \frac{\mathcal{P}}{\pi} \int d\tilde{\omega} \frac{\Im[\epsilon(\vec{r}, \tilde{\omega})]}{\tilde{\omega} - \omega} , \quad (2.15)$$

$$\Im[\epsilon(\vec{r}, \omega)] = -\frac{\mathcal{P}}{\pi} \int d\tilde{\omega} \frac{\Re[\epsilon(\vec{r}, \tilde{\omega})] - 1}{\tilde{\omega} - \omega} , \quad (2.16)$$

genügen muß. In dieser auch als HILBERT-Transformation bekannten Beziehung beschreibt bekanntlich der Realteil den Effekt der Dispersion und der Imaginärteil den Effekt der Absorption. Die Hauptaussage dieser Relation liegt also in der Tatsache, daß es keine Absorption ohne Lichtbrechung und umgekehrt keine Lichtbrechung ohne Absorption geben kann.

Eine weitere Eigenschaft liefert die partielle Integration von (2.12) bis zur ersten Ordnung:

$$\epsilon(\vec{r}, \omega) \approx \left(1 - \frac{\chi(\vec{r}, 0)}{\omega^2}\right) + i \frac{\chi(\vec{r}, 0)}{\omega} + \dots . \quad (2.17)$$

Da  $\chi(\vec{r}, 0)$  kausal ist, folgt für lineare Medien:

$$\text{sgn} \{\Im[\epsilon(\omega)]\} = \text{sgn} [\Re(\omega)] = 1 \quad (2.18)$$

oder für negative Frequenzen

$$\text{sgn} \{\Im[\epsilon(\omega)]\} = \text{sgn} [\Re(\omega)] = -1 . \quad (2.19)$$

Weiterhin folgt aus (2.13), daß der Realteil der Dielektrizitätsfunktion eine gerade Funktion und der Imaginärteil eine ungerade Funktion ist. Zudem verschwindet nach (2.17) das Hauptwertintegral (2.14) bei hohen Frequenzen, so daß man als Grenzfall erhält:

$$\epsilon(\vec{r}, \omega) \rightarrow 1 \quad , \quad |\omega| \rightarrow \infty . \quad (2.20)$$

## 2.2. Dispersions- und absorptionsfreie Medien

Für hinreichend schmalbandige Anteile des elektromagnetischen Feldes fern von Medienresonanzen kann  $\epsilon(\vec{r}, \omega)$  näherungsweise als reell bzw. vernachlässigbar von Absorption und frequenzunabhängig also nicht dispersiv angesehen werden,

$$\epsilon(\vec{r}, \omega) \approx \epsilon(\vec{r}) = \epsilon^*(\vec{r}) .$$

Für Schmalbandfelder kann die Quantisierung in ähnlicher Weise wie für das *komplette* Feld im freien Raum erfolgen. So ist aus (2.9) und (2.11) ersichtlich, daß  $\vec{\mathcal{E}}(\vec{r}, \omega)$  einer homogenen Wellengleichung mit, im Gegensatz zur üblichen HELMHOLTZ-Gleichung, räumlich veränderlicher Phasengeschwindigkeit genügt,

$$\vec{\nabla} \times \vec{\nabla} \times \vec{\mathcal{E}}(\vec{r}, \omega) - \frac{\omega^2}{c^2} \epsilon(\vec{r}) \vec{\mathcal{E}}(\vec{r}, \omega) = 0 , \quad (2.21)$$

deren Lösungen der verallgemeinerten Transversalitätsbedingung

$$\vec{\nabla} \cdot \epsilon(\vec{r}) \vec{\mathcal{E}}(\vec{r}, \omega) = 0$$

genügen müssen. Analog zu (2.8) können elektrisches und magnetisches Feld wieder aus einem Vektorpotential hergeleitet werden,

$$\vec{\mathcal{B}}(\vec{r}, \omega) = \vec{\nabla} \times \vec{\mathcal{A}}(\vec{r}, \omega) , \quad \vec{\mathcal{E}}(\vec{r}, \omega) = i\omega \vec{\mathcal{A}}(\vec{r}, \omega) , \quad (2.22)$$

wobei an die Stelle der COULOMB-Eichung die verallgemeinerte Eichbedingung

$$\vec{\nabla} \cdot \epsilon(\vec{r}) \vec{\mathcal{A}}(\vec{r}, \omega) = 0 \quad (2.23)$$

tritt. Zu (2.22) beachte man: Genau wie beim *freien*, elektromagnetischen Feld ist das Skalarpotential kein dynamischer Freiheitsgrad, da es durch die POISSON-Gleichung, die auch in der Eichung (2.23) gültig bleibt, eindeutig durch die vorgegebene Ladungsverteilung bestimmt wird. Im Unterschied dazu ist aber das elektrische



Feld nach (2.23) durch die Inhomogenität des Mediums kein rein transversales Feld mehr<sup>2</sup>.

Da  $\vec{A}(\vec{r}, \omega)$  der homogenen Wellengleichung (2.21) genügt, kann durch diese Gleichung und der Eichbedingung (2.23) wieder ein Eigenwertproblem erzeugt werden, welches auf ein verallgemeinertes System orthogonaler Moden führt, nach denen die Felder entwickelt und wieder bosonische Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren eingeführt werden können. Dabei ist zu beachten, daß der Operator  $\hat{\Theta}_E$  in (2.21),

$$\frac{1}{\epsilon(\vec{r})} \vec{\nabla} \times \vec{\nabla} \times \vec{\mathcal{E}}(\vec{r}, \omega) = \hat{\Theta}_E \vec{\mathcal{E}}(\vec{r}, \omega) , \quad (2.24)$$

offensichtlich nicht hermitesch ist. Physikalische bzw. reelle Eigenwerte und orthogonale Eigenfunktionen können so also nicht gewonnen werden. Jedoch mit (2.11) und (2.9) erhält man für das magnetische Feld:

$$\vec{\nabla} \times \left[ \frac{1}{\epsilon(\vec{r})} \vec{\nabla} \times \vec{\mathcal{B}}(\vec{r}, \omega) \right] \equiv \hat{\Theta}_B \vec{\mathcal{B}}(\vec{r}, \omega) = \frac{\omega^2}{c^2} \vec{\mathcal{B}}(\vec{r}, \omega) .$$

Dieser Operator ist nun hermitesch und eignet sich hervorragend zur Bestimmung der Modenstruktur, da das *Spektrum* des Operators für periodische Randbedingungen durch die *Blochmoden*,

$$\frac{\omega_k^2}{c^2} ,$$

bestimmt wird. Das entsprechende elektrische Feld erhält man dann mit (2.11). Für reine Dielektrika ist es ohnehin nicht erstaunlich, daß  $\hat{\Theta}_B$  hermitesch bleibt. Schließlich wäre die Anwesenheit von Magnetisierungsfelder ( $\mu(\vec{r}) > 1$ ) notwendig, um diesen Zustand zu ändern.

Nach [Sak02] ist es auch möglich eine neue Vektorfunktion

$$\vec{Q}(\vec{r}, \omega) = \sqrt{\epsilon(\vec{r})} \vec{\mathcal{E}}(\vec{r}, \omega)$$

einzuführen und mit dem so gewonnenen neuen hermiteschen Operator

$$\hat{\Theta}_Q = \frac{1}{\sqrt{\epsilon(\vec{r})}} \vec{\nabla} \times \left\{ \vec{\nabla} \times \frac{1}{\sqrt{\epsilon(\vec{r})}} \right\} \quad (2.25)$$

die Eigenfunktionen über das so neu gewonnene Eigenwertproblem zu bestimmen.

### 2.3. Dispersive und absorptive Medien

Das Verfahren versagt, wenn Dispersion und Absorption mit berücksichtigt werden müssen. Würde man in

<sup>2</sup> Im Gegensatz zur elektr. Verschiebung  $\vec{D}(\vec{r}, \omega) = \epsilon(\vec{r}) \vec{\mathcal{E}}(\vec{r}, \omega)$ .

(2.21) anstelle eines reellen  $\epsilon(\vec{r})$  ein komplexwertiges, frequenzabhängiges  $\epsilon(\vec{r}, \omega)$  verwenden und ansonsten weiter so verfahren, so würde man als Lösung von (2.21) gedämpfte Wellen erhalten, welche beim Übergang zur Quantentheorie die Feldoperatoren aufgrund der Absorption wegdämpfen würden. Mit einer komplexen Dielektrizitätsfunktion wären die Operatoren  $\hat{\Theta}_B$  und  $\hat{\Theta}_E$  auch nicht mehr ohne weiteres hermitesch und auch nicht nach [Sak02] in einfacher Weise zu einem hermiteschen Operator umformulierbar.

Allgemein muß demnach auch die klassische Gleichung (2.21) für absorptive Medien falsch sein. Will man dies korrigieren, muß man sich der entsprechenden Materialgleichung (2.5) zuwenden. Im Fall absorptiver Medien muß es sich hierbei um eine Beziehung zwischen den Mittelwerten von Polarisation und elektrischer Feldstärke handeln, jedoch nicht zwischen den Größen selbst. Wären  $\vec{E}(\vec{r}, \omega)$  und  $\vec{P}(\vec{r}, \omega)$  die realen Felder, so könnte es z.B. keine thermische Strahlung geben. Aufgrund der Aussage des von CALLEN und WELTON [CW51] erstmals formulierten Dissipations-Fluktuationstheorems sind Fluktuationen innerhalb des Mediums mit Dissipationen ( $\Im[\epsilon(\vec{r}, \omega)] > 0$ ) verbunden. Ohne Dissipationen verschwinden die Fluktuationen, ohne Fluktuationen existieren keine Zufallsströme, folglich strahlt das Medium nicht. Gemäß dem Dissipations-Fluktuationstheorem<sup>3</sup> muß die rechte Seite von (2.5) durch einen Rauschterm ergänzt werden,

$$\vec{P}(\vec{r}, t) = \epsilon_0 \int_0^\infty d\tau \chi(\vec{r}, \tau) \vec{E}(\vec{r}, t - \tau) + \vec{P}_N(\vec{r}, t)$$

und an die Stelle der homogenen MAXWELL-Gleichungen (2.8), (2.9), (2.10), (2.11) treten die inhomogenen MAXWELL-Gleichungen

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{\mathcal{B}}(\vec{r}, \omega) = 0 , \quad (2.26)$$

$$\vec{\nabla} \times \vec{\mathcal{E}}(\vec{r}, \omega) = i\omega \vec{\mathcal{B}}(\vec{r}, \omega) , \quad (2.27)$$

$$\vec{\nabla} \cdot \epsilon(\vec{r}, \omega) \vec{\mathcal{E}}(\vec{r}, \omega) = \frac{1}{\epsilon_0} \rho_N(\vec{r}, \omega) , \quad (2.28)$$

$$\vec{\nabla} \times \vec{\mathcal{B}}(\vec{r}, \omega) = \mu_0 \vec{j}_N(\vec{r}, \omega) - i \frac{\omega}{c^2} \epsilon(\vec{r}, \omega) \vec{\mathcal{E}}(\vec{r}, \omega) , \quad (2.29)$$

wobei die Rauschladungsdichte  $\rho_N(\vec{r}, \omega)$  und die Rauschstromdichte  $\vec{j}_N(\vec{r}, \omega)$  mit der Rauschpolarisation  $\vec{P}_N(\vec{r}, t)$  gemäß

$$\rho_N(\vec{r}, \omega) = -\vec{\nabla} \cdot \vec{P}_N(\vec{r}, \omega)$$

<sup>3</sup> Aus dem Theorem folgt, daß eine gedämpfte Observable (Dissipationen) immer an Rauschquellen (Fluktuationen) koppelt, damit das thermische Gleichgewicht im Limes großer Zeiten gewährleistet ist [CW51], [Hen04].

und

$$\vec{j}_N(\vec{r}, \omega) = -i\omega \vec{P}_N(\vec{r}, \omega) \quad (2.30)$$

zusammenhängen und die Kontinuitätsgleichung

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{j}_N(\vec{r}, \omega) = i\omega \rho_N(\vec{r}, \omega) \quad (2.31)$$

gilt. Die MAXWELL-Gleichungen (2.27) und (2.29) liefern anstelle der homogenen Wellengleichung nunmehr die inhomogene Wellengleichung

$$\vec{\nabla} \times \vec{\nabla} \times \vec{\mathcal{E}}(\vec{r}, \omega) - \frac{\omega^2}{c^2} \epsilon(\vec{r}, \omega) \vec{\mathcal{E}}(\vec{r}, \omega) = i\omega \mu_0 \vec{j}_N(\vec{r}, \omega), \quad (2.32)$$

die wegen (2.31) mit der verbliebenen MAXWELL-Gleichung (2.28) kompatibel ist. Die Lösung des Problems kann mittels der tensoriellen GREENS-Funktion quellenmäßig dargestellt werden,

$$\mathcal{E}_k(x_l, \omega) = i\mu_0 \omega \int d^3r' G_{kk'}(x_l, x'_l, \omega) j_{Nk'}(x'_l, \omega), \quad (2.33)$$

wobei die GREENS-Funktion die Lösung der inhomogenen Wellengleichung (2.32) mit  $\delta$ -förmiger Quelle ist, die der Randbedingung im Unendlichen genügen muß, <sup>4</sup>

$$\left[ \partial_k \partial_l - \delta_{kl} \left( \Delta + \frac{\omega^2}{c^2} \epsilon(\vec{r}, \omega) \right) \right] G_{lm} = \delta_{km}^\perp(\vec{r} - \vec{r}'). \quad (2.34)$$

Die transversale  $\delta^\epsilon$ -Funktion ist dabei eine Erinnerung an die verallgemeinerte Eichbedingung

$$\vec{\nabla} \cdot \epsilon(\vec{r}, \omega) \vec{A}(\vec{r}, \omega) = 0, \quad (2.35)$$

die immer noch notwendig ist, um nach (2.28) und (2.31) mit Hilfe einer transversalen Rauschstromdichte die von Rauschladungsdichten abhängigen skalaren Potentiale automatisch auszuschließen. Mit der Eigenschaft

$$\partial_k \epsilon(x_l, \omega) \delta_{kk'}^\perp(x_l - x'_l) = 0$$

der transversalen  $\delta^\epsilon$ -Funktion befindet man sich automatisch immer im Raum der *verallgemeinert* transversalen Vektorfunktionen und die Eichbedingung (2.35) muß nicht immer mitgeführt werden.

Das Feld (2.33) erfüllt sowohl die inhomogene Wellengleichung als auch die verbliebene MAXWELL-Gleichung (2.28). Die quellenmäßige Darstellung des magnetischen

Feldes folgt unmittelbar aus (2.27) und (2.33). Anschaulich bedeutet Gleichung (2.33), daß man an jeder Stelle im Raum  $\vec{r}'$ , an der die Quelle  $\vec{j}_N(\vec{r}', \omega)$  nicht verschwindet, die GREENS-Funktion als Ergebnis einer punktförmigen Inhomogenität gewichtet mit der entsprechenden Ladungsdichte ansetzt und alle diese Lösungen linear überlagert.

Um die Feldgleichungen (2.26)-(2.29) sowie die daraus resultierende, quellenmäßige Darstellung des elektrischen Feldes in (2.33) und die entsprechende Darstellung für das magnetische Feld direkt in die Quantentheorie als operatorwertige Gleichungen zu übernehmen, muß der Rauschstrom wie folgt festgelegt werden:

$$\hat{\mathbf{j}}_N(\vec{r}, \omega) = \omega \sqrt{\frac{\hbar \epsilon_0}{\pi}} \Im[\epsilon(\vec{r}, \omega)] \hat{\mathbf{f}}(\vec{r}, \omega). \quad (2.36)$$

Die Einführung einer solchen Rauschstromdichte wird durch das Dissipations-Fluktuation-Theorem gefordert. Zum einen ist damit gesichert, daß bei fehlender Absorption auch die Rauschstromdichte verschwindet. Zum anderen können mit Hilfe des dynamischen Freiheitsgrades  $\vec{f}(\vec{r}, \omega)$  die allgemeinen Vertauschungsrelationen zwischen den kanonisch konjugierten Größen des elektromagnetischen Feldes gesichert werden,

$$\left[ \hat{A}_k(\vec{r}), \hat{E}_l(\vec{r}') \right] = -\frac{i\hbar}{\epsilon_0} \delta_{kl}^\perp(\vec{r} - \vec{r}'), \quad (2.37)$$

wenn man  $\vec{f}(\vec{r}, \omega)$  mit entsprechendem bosonischem Charakter ausstattet,

$$\left[ \hat{f}_k(x_l, \omega), \hat{f}_{k'}^\dagger(x'_l, \omega') \right] = \delta_{kk'}^\perp(x_l - x'_l) \delta(\omega - \omega'), \quad (2.38)$$

$$\left[ \hat{f}_k(x_l, \omega), \hat{f}_{k'}(x'_l, \omega') \right] = 0, \quad (2.39)$$

$$\left[ \hat{f}_k^\dagger(x_l, \omega), \hat{f}_{k'}^\dagger(x'_l, \omega') \right] = 0. \quad (2.40)$$

Das Kontinuum von bosonischen Feldern  $\hat{\mathbf{f}}(\vec{r}, \omega)$  beschreibt gewissermaßen die elementaren Anregungen des betrachteten Gesamtsystems, also elektromagnetisches Feld, Polarisationsfeld und dissipatives System. Die fundamentalen Felder  $\hat{\mathbf{f}}(\vec{r}, \omega)$  und  $\hat{\mathbf{f}}^\dagger(\vec{r}, \omega)$  ermöglichen es damit, sämtliche elektromagnetischen Felder auszudrücken, die als kanonisch konjugierte Grundvariablen der Theorie aufgefaßt werden können. Das neue Quasiteilchen, das bei der Wechselwirkung mit dem elektromagnetischen Feld entsteht, wird Polariton genannt und ist das Ergebnis einer Kopplung zwischen einem Photon und der elementaren Anregung im Medium. Nach (2.6), (2.33) und (2.36) ergibt sich für den Operator der elektrischen Feldstärke im SCHRÖDINGER-Bild:

<sup>4</sup> Über wiederkehrende Indizes wird summiert. Außerdem:

$$\begin{aligned} \left( \vec{\nabla} \times \vec{\nabla} \times \vec{A} \right)_\alpha &= \epsilon_{\alpha\beta\gamma} \partial_\beta \epsilon_{\gamma\lambda\mu} \partial_\lambda A_\mu \\ &= (\delta_{\lambda\alpha} \delta_{\mu\beta} - \delta_{\lambda\beta} \delta_{\mu\alpha}) \partial_\beta \partial_\lambda A_\mu \\ &= \left( \vec{\nabla} \vec{\nabla} A \right)_\alpha - \Delta A_\alpha. \end{aligned}$$

$$\hat{E}_k(x_l) = \nu\mu_0 \sqrt{\frac{\hbar\epsilon_0}{\pi}} \int_0^\infty d\omega \omega^2 \int d^3r' G_{kk'}(x_l, x'_l, \omega) \sqrt{\Im[\epsilon(x'_l, \omega)]} \hat{f}_{k'}(x'_l, \omega) + \text{h. c.} \quad (2.41)$$

Die Darstellung des Operators der magnetischen Feldstärke folgt unmittelbar aus (2.7), (2.27), (2.33) sowie (2.36). Die Gleichung (2.41) stellt die direkte Verallgemeinerung zum klassischen Problem der Bestimmung der Modenstruktur des elektromagnetischen Feldes dar. Dabei wird das Problem auf die Bestimmung des GREEN-Tensors reduziert, sofern das Dielektrikum durch eine entsprechende Dielektrizitätsfunktion wohl definiert ist. Um die Korrektheit der Quantisierung zu prüfen, muß *Vollständigkeit* vorausgesetzt werden. Dies kann gezeigt werden, wenn das elektromagnetische Feld die fundamentalen, gleichzeitigen Vertauschungsrelationen nach (2.37)-(2.40) erfüllt. Dabei müssen hinsichtlich des Mediums nur sehr allgemeine, aus Kausalitätsgründen resultierende Eigenschaften für die Dielektrizitätsfunktion  $\epsilon(x_l, \omega)$  vorausgesetzt werden, ohne die konkrete analytische Gestalt im Einzelfall zu kennen [HB92], [GW96a].

Im HEISENBERG-Bild ist die zeitliche Entwicklung der Felder  $\hat{\mathbf{f}}(\vec{r}, \omega)$  harmonisch,

$$\hat{\mathbf{f}}(\vec{r}, \omega, t) = \hat{\mathbf{f}}(\vec{r}, \omega) \cdot e^{-i\omega t} .$$

Bis auf die ansonsten unwichtige Nullpunktenergie kann der HAMILTON-Operator des Gesamtsystems somit in der Form

$$\hat{\mathbf{H}} = \int d^3r \int_0^\infty d\omega \hat{f}_k^\dagger(x_l, \omega) \hat{f}_k(x_l, \omega) \quad (2.42)$$

angegeben werden.

#### 2.4. Skalenverhalten

An dieser Stelle sei erwähnt, daß die inhomogene Wellengleichung (2.32) mit der in (2.30) definierten Rauschstromdichte sowie die homogene Wellengleichung (2.21) im Gegensatz zu anderen physikalischen Systemen von einer bestimmten Länge nicht abhängig sind. Sie sind damit skaleninvariant. Dazu skaliere man entsprechend den Ort  $\vec{r}$  mit einem Parameter  $s$  und substituiere in (2.32)

$$\vec{\tau} = s \cdot \vec{r} \quad , \quad \vec{\nabla}_\tau = \frac{\vec{\nabla}}{s} .$$

Mit der Rauschstromdichte aus (2.30) folgt:

$$\hat{\Theta}_\tau \vec{\mathcal{E}}\left(\frac{\vec{\tau}}{s}, \omega\right) = \frac{\omega^2}{s^2 c^2} \epsilon\left(\frac{\vec{\tau}}{s}, \omega\right) \vec{\mathcal{E}}\left(\frac{\vec{\tau}}{s}, \omega\right) + \frac{\omega^2}{s^2} \mu_0 P_N\left(\frac{\vec{\tau}}{s}, \omega\right)$$

wobei

$$\hat{\Theta}_\tau = \vec{\nabla}_\tau \times \vec{\nabla}_\tau \times .$$

QED in periodischen und absorbierenden Medien

Mit den Substitutionen

$$\tilde{\omega} = \frac{\omega}{s} \quad , \quad \epsilon(\vec{\tau}, \tilde{\omega}) = \epsilon\left(\frac{\vec{\tau}}{s}, \tilde{\omega} s\right)$$

$$\mathcal{E}(\vec{\tau}, \tilde{\omega}) = \mathcal{E}\left(\frac{\vec{\tau}}{s}, \tilde{\omega} s\right) \quad , \quad \mathfrak{P}_N(\vec{\tau}, \tilde{\omega}) = P_N\left(\frac{\vec{\tau}}{s}, \tilde{\omega} s\right)$$

ergibt sich somit für das gestreckte System:

$$\hat{\Theta}_\tau \mathcal{E}(\vec{\tau}, \tilde{\omega}) = \frac{\tilde{\omega}^2}{c^2} \epsilon(\vec{\tau}, \tilde{\omega}) \mathcal{E}(\vec{\tau}, \tilde{\omega}) + \tilde{\omega}^2 \mu_0 \mathfrak{P}_N(\vec{\tau}, \tilde{\omega}) . \quad (2.43)$$

Die inhomogene Wellengleichung in (2.43) stimmt mit der Form der Wellengleichung nach (2.32) überein. Wenn man also ein bekanntes System mit einem Parameter  $s$  streckt, so muß man lediglich die Eigenfunktionen und Frequenzen mit dem gleichen Faktor  $s$  strecken und erhält somit sofort alle Informationen über das neue System. Man untersucht daher photonische Kristalle und andere periodische Strukturen mit Perioden im Mikrowellenbereich, da es viel günstiger ist diese herzustellen und kann die Ergebnisse dann direkt auf die für die Anwendung wichtigeren Strukturen im Bereich von  $\mu\text{m}$ -Wellenlängen übertragen.

#### 2.5. Lineare, homogene Medien

Aufgrund ihrer Bedeutung, sollen hier noch einmal die homogenen Medien hervorgehoben werden. Ein heuristischer Ansatz für die Suszeptibilität im Bild der klassischen Physik ist das DRUDE-Modell [Jac02]. Es eignet sich besonders für Metalle und liefert ein brauchbares Rechenmodell.

Im Fall homogener Medien führt die Eichbedingung (2.35) auf die COULOMB-Eichung

$$\vec{\nabla} \cdot \mathcal{A}(\vec{r}, \omega) = 0 .$$

Die transversale  $\delta_\epsilon$ -Funktion geht damit in die gewöhnliche transversale  $\delta$ -Funktion über. Nach (2.33) müssen auch die Komponenten der tensoriellen GREENS-Funktion diese Bedingung erfüllen,

$$\partial_k G_{kk'}(x_l, x'_l, \omega) = 0 .$$

Gleichung (2.34) vereinfacht sich damit zu:

$$\left(\Delta + \frac{\omega^2}{c^2} \epsilon(\omega)\right) G_{lm}(\vec{r}, \vec{r}', \omega) = -\delta_{lm}^\perp(\vec{r} - \vec{r}') . \quad (2.44)$$

Hat man eine skalare GREENS-Funktion gefunden, die diese Gleichung erfüllt, kann man unter Verwendung

der expliziten Darstellung der transversalen  $\delta$ -Funktion [CTDRG89],

$$\delta_{lm}^\perp(\vec{r}) = \delta_{lm} \delta(\vec{r}) - \frac{1}{(2\pi)^3} \int_{-\infty}^{\infty} d^3\vec{k} \frac{k_l k_m}{k^2} e^{i\vec{k}\vec{r}},$$

die Lösung von (2.44) erhalten, indem man die skalare GREENS-Funktion auf den Raum der transversalen Vektorfunktionen projiziert,

$$G_{lm}(\vec{r}, \vec{r}', \omega) = \int_{-\infty}^{\infty} d^3\vec{r}'' G^+(\vec{r}, \vec{r}'', \omega) \delta_{lm}^\perp(\vec{r}'' - \vec{r}').$$

Für eine Punktquelle ohne transversale Eigenschaft findet man die bekannte Lösung<sup>5</sup>

$$\begin{aligned} G_{ll}(\vec{r}, \vec{r}', \omega) &= G^+(\vec{r}, \vec{r}', \omega) \\ &= \frac{\exp\left[i\frac{\omega}{c}\sqrt{\epsilon(\omega)}|\vec{r}-\vec{r}'|\right]}{4\pi|\vec{r}-\vec{r}'|}. \end{aligned} \quad (2.45)$$

Die Lösung (2.45) ist die freie, skalare GREENS-Funktion einer skalaren Wellengleichung, genauer gesagt, eine Lösung, die einer auslaufenden Kugelwelle entspricht. Da die Wellengleichung eine Differentialgleichung zweiter Ordnung ist, existiert natürlich noch eine andere Lösung, welche einer einlaufenden Kugelwelle entspricht. Diese Lösung wird für den freien Raum als unphysikalisch verworfen, da keine Energie aus dem Unendlichen einstrahlt werden darf. Man formuliert daher für die Lösung  $G^+(\vec{r}, \vec{r}', \omega)$  der Wellengleichung die Randbedingung im Unendlichen

$$\lim_{r \rightarrow \infty} r \left( \frac{\partial}{\partial r} - i\frac{\omega}{c}\sqrt{\epsilon(\omega)} \right) G^+(r, \omega) = 0. \quad (2.46)$$

Diese auch als SOMMERFELDSche Strahlungsbedingung bekannte Randbedingung sichert die Eindeutigkeit der Lösung. Es läßt sich leicht sehen, daß  $G^-(\vec{r}, \vec{r}', \omega)$  diese Bedingung nicht erfüllt. Ebenfalls läßt sich erkennen, was die Strahlungsbedingung fordert: Die Ableitung des oszillierenden Teils wird durch den zweiten Summanden in (2.46) unter Beachtung des Vorzeichens wieder entfernt. Flächen konstanter Phase wandern also in der Zeit nach außen und die Funktion strebt gemäß  $1/r^2$  asymptotisch, hinreichend schnell gegen null.

<sup>5</sup> Das Problem wird sphärisch symmetrisch um den Ursprung gemacht, indem man  $\vec{r}_0 = \vec{r} - \vec{r}'$  setzt. Die Wellengleichung erhält dann die Form einer sphärischen BESSELSchen-Differentialgleichung nullter Ordnung. Um die Ausstrahlungsbedingung (2.46) zu erfüllen, setzt man eine Lösung proportional zur sphärischen HANKELfunktion erster Art und nullter Ordnung an. Den Proportionalitätsfaktor erhält man durch Integration der BESSELSchen-Differentialgleichung über eine infinitesimale Kugel um den Nullpunkt mit Hilfe des Satzes von GAUSS. Nach Rücktransformation in das ursprüngliche Koordinatensystem erhält man als Lösung die Form (2.45).

Es bleibt zu bemerken, daß die Strahlungsbedingung in der Form (2.46) so nur streng für reelle Dielektrizitätsfunktionen gültig ist. Da  $\epsilon(\omega)$  aber eine komplexwertige Funktion mit den Einschränkungen (2.18), (2.19) ist, sind zusätzliche Forderungen notwendig, damit (2.46) gültig bleibt. In Übereinstimmung mit [Som78] folgt für die Strahlungsbedingung (2.46) bei positiven Frequenzen in der oberen Halbebene:

$$\text{sgn}\{\Im[\epsilon(\omega)]\} = \text{sgn}\{\Re(\omega)\} = 1.$$

Im Fall linear polarisierter Strahlung vereinfacht sich das Problem aus (2.44) und (2.35) auf eine Dimension und die Eichbedingung (2.35) wird automatisch erfüllt. Bei Polarisation in x-Richtung,

$$\vec{E}(\vec{r}, \omega) \rightarrow \mathcal{E}_y(x, \omega) = \mathcal{E}(x, \omega),$$

ergibt sich aus Gleichung (2.44):

$$\left( \frac{\partial}{\partial x} - i\frac{\omega}{c}\sqrt{\epsilon(\omega)} \right) \left( \frac{\partial}{\partial x} + i\frac{\omega}{c}\sqrt{\epsilon(\omega)} \right) G = -\delta(x-x'). \quad (2.47)$$

Mit Hilfe der FOURIER-Transformation findet man aus Gleichung (2.47):

$$G(x, x', \omega) = -\frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} dk e^{ik(x-x')} \frac{c^2}{\omega^2 \epsilon(\omega) - c^2 k^2}. \quad (2.48)$$

Als Strahlungsbedingung muß die GREENS-Funktion oder hier das Feld einer Quelle im Unendlichen verschwinden. Dies kann nur durch die auslaufende GREENS-Funktion erfüllt werden,

$$\lim_{|x-x'| \rightarrow \infty} \left( \frac{\partial}{\partial |x-x'|} - i\frac{\omega}{c}\sqrt{\epsilon(\omega)} \right) G^+(x-x', \omega) = 0.$$

Mit (2.18) erkennt man, daß der Nenner

$$\omega^2 \epsilon(\omega) - c^2 k^2$$

in der oberen Halbebene ( $\Im(\omega) > 0$ ) für positive, reelle  $k$  niemals verschwinden kann. Um dies zu sehen, ist es notwendig, den Nenner in die einzelnen Real- und Imaginärteile zu zerlegen:

$$\{[\Re(\omega)]^2 - [\Im(\omega)]^2\} \Re[\epsilon(\omega)] - 2\Im(\omega)\Re(\omega)\Im[\epsilon(\omega)] = k^2 c^2, \quad (2.49)$$

$$\{[\Re(\omega)]^2 - [\Im(\omega)]^2\} \Im[\epsilon(\omega)] + 2\Im(\omega)\Re(\omega)\Re[\epsilon(\omega)] = 0. \quad (2.50)$$

Aus (2.50) folgt:

$$\text{sgn}\{\Re[\epsilon(\omega)]\} = -\text{sgn}\{[\Re(\omega)]^2 - [\Im(\omega)]^2\}. \quad (2.51)$$

Man kann leicht überprüfen, daß (2.49) mit (2.51), (2.18) und  $\Im(\omega) > 0$  nicht erfüllt werden kann. Weicht man mit  $k \in \mathbb{C}$  in (2.48) auf die komplexe Ebene aus, so erhält der Integrand zwei Polstellen  $k_z$  erster Ordnung. Der Brechungsindex wird wie üblich mit

$$n(\omega) = \sqrt{\epsilon(\omega)}$$

eingeführt:

$$-\frac{1}{2\pi} \oint_{\mathcal{C}} dk e^{ik(x-x')} \frac{c^2}{[\omega n(\omega) - ck] \cdot [\omega n(\omega) + ck]} = 2\pi i \sum_{k_z} \text{Res} \left[ \frac{e^{ik(x-x')}}{\omega^2 \epsilon(\omega) - c^2 k^2}, k_z \right]. \quad (2.52)$$

Dabei werden die analytischen Eigenschaften ebenfalls durch die KRAMERS-KRONIG-Relationen (2.15), (2.16) und der Einschränkung (2.18) für die Strahlungsbedingung gegeben. Insbesondere gilt ebenfalls:

$$n(\omega) \rightarrow 1 \quad , \quad |\omega| \rightarrow \infty .$$

In Abhängigkeit von der Lage des Integrationsweges  $\mathcal{C}$  des Kurvenintegrals (2.52) bezüglich der Pole gelangt man zu GREENS-Funktionen mit jeweils verschiedenem Verhalten. Die zunächst offenen Integrationswege können, je nach dem Vorzeichen von  $(x-x')$ , über einen im Unendlichen verlaufenden Halbkreis in der oberen oder unteren Halbebene geschlossen werden. Für  $(x-x') > 0$  wächst die Exponentialfunktion  $e^{ik(x-x')}$  in der unteren Halbebene unbeschränkt an. Der Halbkreis ist daher in der oberen Halbebene zu schließen. Für den Fall  $(x-x') < 0$  erfolgt der Abschluß dann entsprechend in der unteren Halbebene. Man wird immer eine Polstelle in der oberen oder unteren Halbebene finden. Verschwindet der Beitrag des im Unendlichen verlaufenden Halbkreises zum Integral in der komplexen Ebene, kann das reelle Integral mit Hilfe des *Residuensatzes* bestimmt werden. Da es sich um Polstellen erster Ordnung handelt, kann das betreffende Residuum leicht ermittelt werden. Der Integralbeitrag eines solchen im Unendlichen verlaufenden Bogens für (2.52) kann relativ leicht abgeschätzt werden, daher soll an dieser Stelle auf die dazu entsprechende Literatur verwiesen werden [Bus00], [Jac02].

Schließt man den Halbkreis in der oberen Halbebene so erhält man letztendlich als GREENS-Funktion für homogene, lineare Medien bei linearer Polarisation der Strahlung, die die Strahlungsbedingung erfüllt:

$$G^+(x, x', \omega) = \left[ -2i \frac{\omega}{c} n(\omega) \right]^{-1} \exp \left[ i \frac{\omega}{c} n(\omega) |x - x'| \right]. \quad (2.53)$$

Diese Lösung erfüllt die Randbedingung im Unendlichen und die Differentialgleichung (2.47) (siehe A). Mit der Wahl einer geeigneten Strahlungsbedingung wird damit nicht nur die korrekte Lösung für das Feld bestimmt, sondern auch die richtige Dispersionsrelation  $\omega(k)$  hervorgehoben. Die kanonisch konjugierten Größen Feld und Vektorpotential sind nach (2.41) und (2.22) gegeben. Die Vertauschungsrelation (2.37) kann mit Hilfe der Eigenschaften der Dielektrizitätsfunktion sowie (2.38)-(2.40) überprüft werden [GW96a].

### 3. DIE PHOTONISCHE BANDSTRUKTUR

#### 3.1. Das BLOCH-Theorem

Eindimensionale, periodische Gitter werden genau wie für Elektronen in der Festkörperphysik durch das KRONIG-PENNEY-Modell [Mer98] realisiert, welches im konkreten Fall Elektronen näherungsweise ein mit periodisch angeordneten Atomen konstruiertes Ionenkristallgitter aussetzt. Die Wahrscheinlichkeitsdichte

$$\rho = \psi\psi^*$$

wird dabei durch das SCHRÖDINGERSche Materiefeld mit Hilfe der SCHRÖDINGER-Gleichung bestimmt. Die *Anregungen* des elektrischen, *verlustfreien* Feldes müssen mit dem aus 2.2 hergeleiteten Operator  $\hat{\Theta}_E$  aus (2.24),

$$\hat{\Theta}_E = -\epsilon(x)^{-1}\partial_x^2,$$

ermittelt werden. Das durch das KRONIG-PENNEY-Modell realisierte *Pseudopotential* ist dabei durch die periodische, materialabhängige Dielektrizitätsfunktion

$$\epsilon(x) = \epsilon(x+a),$$

die im absorptionsfreien Fall eine ausschließlich reelle Funktion ist, gegeben. Der Begriff Potential ist dabei mit Vorsicht zu verwenden. Schließlich beschreiben Potentiale die in der Mechanik durch die Dynamik mit einer Wechselwirkung hervorgehenden Kräfte, während die Dielektrizitätsfunktion ein Ergebnis der *Responsfunktion* in der Materialgleichung (2.5) darstellt. Im Rahmen einer periodischen Struktur oder eines Gitters ist es daher sinnvoller das Potential direkt mit einer Anordnung von *Streuer* zu verbinden.

Nach 2.2 können mit (2.24) nur die schmalbandigen Anteile des elektromagnetischen Feldes gewonnen werden. Die so gewonnenen *Moden* werden allgemein auch als *Blochmoden* bezeichnet. Das der Operator (2.24) nicht hermitesch ist, soll dabei zunächst nicht mitberücksichtigt werden. Die periodische Dielektrizitätsfunktion hat die Eigenschaft, daß sie invariant unter einer Translation um eine bestimmte Distanz  $a$  und deren Vielfache ist. Man kann daher einen Translationsoperator  $\hat{\mathbf{T}}_a$  definieren mit

$$\hat{\mathbf{T}}_a |x\rangle = |x-a\rangle, \quad \langle x| \hat{\mathbf{T}}_a = \langle x+a|.$$

Es gilt dann auch, daß

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{T}}_a |p\rangle &= \int_{-\infty}^{+\infty} dx |x\rangle \langle x+a| p\rangle \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} dx e^{ip(x+a)/\hbar} |x\rangle \\ &= e^{ipa/\hbar} |p\rangle. \end{aligned}$$

Offenbar gilt:

$$\hat{\mathbf{T}}_a = e^{i\hat{\mathbf{p}}a/\hbar}.$$

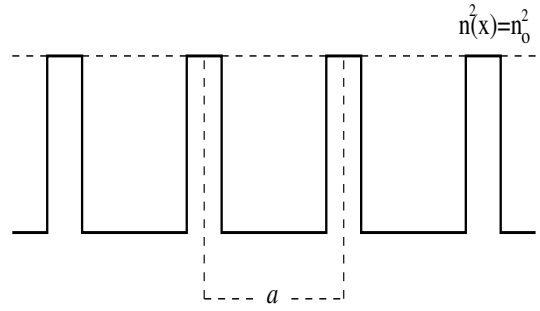


Abbildung 1: Eindimensionales, periodisches Gitter nach KRONIG-PENNEY mit stückweise konstantem Brechungsindex  $n_0$  und Periode  $a$ .

Das heißt, man kann die Translation durch den Impulsoperator darstellen und der Translationsoperator ist unitär,

$$\hat{\mathbf{T}}_a^{-1} = \hat{\mathbf{T}}_a^\dagger,$$

da der Impulsoperator,

$$\hat{\mathbf{p}} |x\rangle = i\hbar\partial_x |x\rangle,$$

hermitesch ist. Für die Verschiebung des elektrischen Feldes

$$\mathcal{E}(x, \omega) = \mathcal{E}(x)$$

um  $a$  erhält man:

$$\mathcal{E}(x+a) = \hat{\mathbf{T}}_a \mathcal{E}(x).$$

Da offensichtlich

$$[\hat{\mathbf{T}}_a, \hat{\mathbf{p}}^2] = 0,$$

folgt mit

$$\epsilon(x+a)^{-1} (\partial_x^2 \mathcal{E})(x+a) - \epsilon(x)^{-1} \partial_x^2 \mathcal{E}(x+a) = 0,$$

daß auch der Operator  $\hat{\Theta}_E$  der Wellengleichung (2.21) mit dem Translationsoperator kommutiert,

$$[\hat{\mathbf{T}}_a, \hat{\Theta}_E] = 0. \quad (3.1)$$

Die eindimensionale Wellengleichung ist eine gewöhnliche Differentialgleichung zweiter Ordnung und besitzt daher als solche zwei linear unabhängige Lösungen. Zu jedem Eigenwert  $\omega^2/c^2$  seien dies  $\mathcal{E}_+$  und  $\mathcal{E}_-$ . Nach (3.1) kann man  $\mathcal{E}_+$ ,  $\mathcal{E}_-$  gleichzeitig als Eigenfunktion des Translationsoperators wählen,

$$\hat{\mathbf{T}}_a \mathcal{E}_i(x) = \mathcal{E}_i(x+a) = \lambda_i \mathcal{E}_i(x), \quad i \in \{+, -\}.$$

Die  $\lambda_i$  sind die *frequenzabhängigen* Eigenwerte des Translationsoperators.

In der Quantenmechanik setzt man immer Kontinuität für den Begriff der Wahrscheinlichkeit voraus. Er läßt sich

allgemein, unabhängig von der Natur des Feldes auf jede Art der Wellengleichung übertragen. Dazu wird neben der Wahrscheinlichkeitsdichte die Wahrscheinlichkeitsstromdichte eingeführt. Für die hier verwendete Form ist es günstiger von der mathematisch korrekten Interpretation als WRONSKI-Determinante auszugehen, da mit der Wahrscheinlichkeitsstromdichte immer ein Ausdruck quadratisch in einem Feld suggeriert werden kann. Durch die Existenz der WRONSKI-Determinante,

$$W(x) = \mathcal{E}_+(x)\partial_x\mathcal{E}_-(x) - \mathcal{E}_-(x)\partial_x\mathcal{E}_+(x),$$

können dabei immer die zwei linear unabhängigen Lösungen  $\mathcal{E}_+$  und  $\mathcal{E}_-$  voneinander unterschieden werden. Wegen

$$\hat{\mathbf{H}}_E\mathcal{E}_i(x) = \frac{\omega^2}{c^2}\mathcal{E}_i(x) \quad (3.2)$$

bleibt,

$$\begin{aligned} \partial_x W(x) &= \partial_x [\mathcal{E}_+(x)\partial_x\mathcal{E}_-(x) - \mathcal{E}_-(x)\partial_x\mathcal{E}_+(x)] \\ &= \mathcal{E}_+(x)\partial_x^2\mathcal{E}_-(x) - \mathcal{E}_-(x)\partial_x^2\mathcal{E}_+(x) \\ &= \epsilon(x)\frac{\omega^2}{c^2} [\mathcal{E}_-(x)\mathcal{E}_+(x) - \mathcal{E}_+(x)\mathcal{E}_-(x)] \\ &= 0, \end{aligned} \quad (3.3)$$

die durch die WRONSKI-Determinante beschriebene Größe erhalten,

$$W(x) = \text{const.}$$

Damit ist aber auch  $W$ ,

$$W(x) = W(x+a) = \lambda_+\lambda_- W(x),$$

eine Eigenfunktion des Translationsoperators und es folgt:

$$\lambda_+\lambda_- = 1.$$

Mit

$$\mathcal{E}_i^*(x+a) = \hat{\mathbf{T}}_a\mathcal{E}_i^*(x) = \lambda_i^*\mathcal{E}_i^*(x)$$

sind auch die komplex konjugierten Eigenwerte  $\lambda_i^*$  Teil des Spektrums von  $\hat{\mathbf{T}}_a$ , können aber wegen der linearen Unabhängigkeit von  $\mathcal{E}_+$  und  $\mathcal{E}_-$  von  $\lambda_i$  nicht verschieden sein. Daher ist entweder

$$\lambda_-^* = \lambda_- \quad \wedge \quad \lambda_+^* = \lambda_+ \quad \Rightarrow \quad \lambda_i \in \mathbb{R} \quad (3.4)$$

oder

$$\lambda_-^* = \lambda_+ \quad \wedge \quad \lambda_+^* = \lambda_- \quad \Rightarrow \quad |\lambda_i|^2 = 1. \quad (3.5)$$

In (3.4) sei o.B.d.A.  $|\lambda_i| > 1$ . Dies wäre unvereinbar mit der Normierbarkeit und der Periodizität, da die Lösungen

$$\mathcal{E}_i(x+Na) = \lambda_i^N\mathcal{E}_i(x) \longrightarrow \pm\infty$$

mit  $N \rightarrow \pm\infty$  exponentiell anwachsen würden. Es muß also (3.5) zutreffen. Daher kann man

$$\lambda_+ = e^{iak_\omega} \quad \wedge \quad \lambda_- = e^{-iak_\omega} \quad , \quad ak_\omega \in \mathbb{R} \quad (3.6)$$

definieren und es folgt:

$$\begin{aligned} \mathcal{E}_+(x+a) &= e^{iak_\omega}\mathcal{E}_+(x), \\ \mathcal{E}_-(x+a) &= e^{-iak_\omega}\mathcal{E}_-(x), \end{aligned}$$

wobei  $ak_\omega = 0$  den Fall  $\lambda_i = 1$  miteinschließt. Die Darstellung des Translationsoperators ist also unitär und die Wirkung des Translationsoperators auf das elektrische Feld einzig durch Multiplikation eines Phasenfaktors bestimmt, so daß man das elektrische Feld zu

$$\mathcal{E}_i(x) = e^{ik_\omega x}\phi_i(x)$$

zerlegen darf. Dabei muß wegen

$$\begin{aligned} e^{iak_\omega}e^{ik_\omega x}\phi_+(x) &= e^{iak_\omega}\mathcal{E}_+(x) \\ &= \mathcal{E}_+(x+a) \\ &= e^{iak_\omega}e^{ik_\omega x}\phi_+(x+a) \end{aligned}$$

die BLOCH-Funktion

$$\phi_i(x+a) = \phi_i(x)$$

invariant unter Translation bleiben. Die Tatsache, daß das elektrische Feld diese Struktur hat, wird auch BLOCH-Theorem genannt [Sak02]. Das Theorem besagt nicht, daß das Feld im periodischen Potential bis auf eine Phase periodisch ist. Als Gegenbeispiel denke man in der Quantenmechanik an das freie Teilchen mit verschwindendem Potential. Das Potential  $V=0$  ist trivialerweise periodisch. Dennoch sind die Wellenpakete nicht periodisch. Sie sind aus periodischen Funktionen zusammengesetzt. Man unterdrückt allgemein den Index am elektrischen Feld und schreibt:

$$\mathcal{E}_k(x) = e^{ikx}\phi_k(x), \quad (3.7)$$

wobei  $\mathcal{E}_k$  und  $\mathcal{E}_{-k}$  linear unabhängig sind und  $\phi_k$  periodisch ist.

### 3.2. Absorptionsfreie Medien

Die Differentialgleichung, die die BLOCH-Funktion bestimmt, folgt mit (3.7) aus der Eigenwertgleichung (3.2) zu:

$$-\frac{1}{\epsilon(x)}(\partial_x^2 + 2ik\partial_x - k^2)\phi_k(x) = \frac{\omega_k^2}{c^2}\phi_k(x). \quad (3.8)$$

Der Parameter  $k$  wird auch als *Pseudoimpuls* bezeichnet. Es gilt:

$$\lambda_+ = e^{ika} = \exp\left[ia\left(k + n\frac{2\pi}{a}\right)\right], \quad n \in \mathbb{Z}.$$

Das heißt  $k$  und  $k + n2\pi/a$  entsprechen demselben Eigenwert. Daher benötigt man  $k$  nur auf einem endlichen Bereich

$$-\frac{\pi}{a} \leq k \leq \frac{\pi}{a},$$

der ersten BRILLOUINzone. Der Pseudoimpuls  $k$  ist also ein im *reziproken* Raum dargestellter Gittervektor  $a$ . Die Darstellung der BRILLOUINzone im Ortsraum wird dann analog zur Festkörperphysik von Kristallsystemen als WIGNER-SEITZ-Zelle bezeichnet.

Am Ende ist es daher auch nicht mehr erstaunlich, daß ein eigentlich nicht hermitescher Operator trotzdem reelle Eigenwerte mit linear unabhängigen Eigenfunktionen erzeugt. Die Tatsache, daß der Operator  $\hat{\Theta}_E$  mit (3.1) die Symmetriegruppe der diskreten Translationen im Gitter besitzt und dadurch beide über dieselben Eigenräume verfügen, erzwingt eben diese Eigenschaft.

Der Pseudoimpuls  $k$  ist eine ausschließlich reelle Größe. Die Differentialgleichung (3.8), in der  $k$  als Parameter auftaucht, besitzt aber auch Lösungen für komplexe  $k \in \mathbb{C}$ . Felder, die ausschließlich das Ergebnis einer Translationsymmetrie sein sollen (Blochmoden), dürfen aufgrund dieser Symmetrie in (3.2) nur reellen Eigenwerten  $\omega_k^2/c^2$  zugeordnet werden. Im Spektrum  $\omega(k)$  fehlen daher die den komplexen  $k$  zugeordneten Eigenwerte. Dieser Bereich stellt damit ähnlich den Elektronen in der Festkörperphysik die verbotene Zone oder auch Bandlücke dar. Da  $\omega(k)$  innerhalb eines Bandes stetig ist, kann jeder kontinuierliche  $k$ -Bereich einer BRILLOUINzone mit einer Bandnummer  $n$  und einem kontinuierlichen Bereich  $\omega_n(k)$  im Spektrum identifiziert werden. Oder umgekehrt, aufgrund der  $k$ -Entartung existiert für jedes  $k$  ein unendlicher Satz von Moden mit diskreten Frequenzen  $\omega_n$ , die man mit dem Bandindex  $n$  durchnummerieren kann. Die Bandlücken selbst treten immer am Rand der jeweiligen Bänder auf.

Da die komplexe Konjugation von (3.8) auch durch das komplex Konjugierte  $\omega^*(k)$  gelöst wird, aber  $\omega(k) \in \mathbb{R}$  folgt im Fall ohne Absorption:

$$\omega(k) = \omega(-k).$$

Die zugehörigen Frequenzen zu  $k$  und  $-k$  unterscheiden sich also nicht. Dies ist auch nicht verwunderlich, schließlich sind die MAXWELL-Gleichungen in diesem Fall zeitumkehrinvariant. Der Vorteil ist, daß sich das Gebiet, für die man die *photonische* Bandstruktur berechnen muß, auf die halbe BRILLOUINzone verkleinert.

An den Bandgrenzen muß  $\omega(k)$  einen Extremalwert annehmen. Als Bestandteile von Lösungen der Eigenwertgleichung (3.8) hängen  $e^{ika}$  und  $e^{-ika}$  vom Eigenwert  $\omega$  ab. Somit ist

$$e^{ika} + e^{-ika} = 2 \cos[ka] = 2\Re[\lambda_+(\omega)].$$

Differentiation nach  $\omega$  liefert:

$$-\frac{1}{a} \Re[\partial_\omega \lambda_+(\omega)] \frac{\partial \omega}{\partial k} = \sin[ka].$$

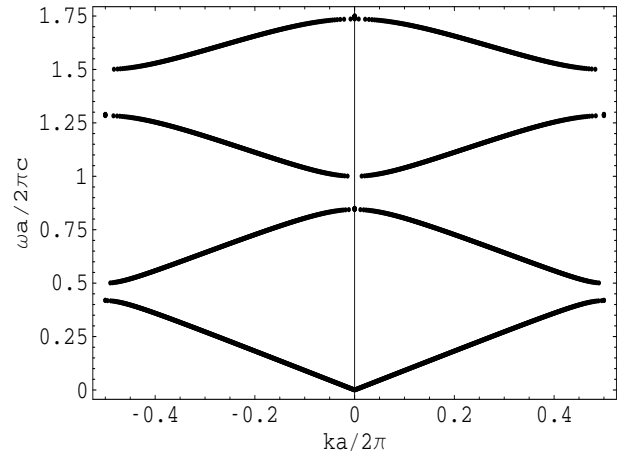


Abbildung 2: Photonische Bandstruktur einer  $\infty$ -periodischen Anordnung von  $\delta$ -Streuern (siehe 5.1) mit einer Periode  $a$  und Polarisierbarkeit  $\alpha = 0.2a$ . Deutlich werden vier Bänder mit den entsprechenden Bandlücken sichtbar. Die Form der Bandstruktur ist ein Ergebnis der idealen, unendlichen Anordnung durch Punktstreuer. In der Realität sind die Bandkanten weniger scharf und die Bandlücken treten aufgrund vorhandener Absorption weniger stark in Erscheinung. Mit zunehmender Bandnummer werden die Bänder immer schmäler und die Bandlücken immer größer.

Die Felder selbst und deren Fortsetzung mit Hilfe des Translationsoperators müssen stetig differenzierbar sein, daraus folgt mit  $ka = \pm n\pi$ :

$$\left. \frac{\partial \omega}{\partial k} \right|_{ka=\pm n\pi} \sim \sin(\pm n\pi) = 0.$$

Auf der Bandkante wird daher in der Tat  $\omega(k)$  extremal.

### 3.3. Absorptive Medien

Läßt man Absorption im periodischen Gitter zu, so sind nach 2.3 die *verlustbehafteten* Felder die zu bestimmenden Lösungen der inhomogenen Wellengleichung. Die Lösungen der homogenen Wellengleichung bleiben trotzdem auch für den absorptiven Fall von Interesse, da für das im Folgenden verwendete Punktstreuermodell das Feld außerhalb der Quellen durch einlaufende und auslaufende Wellen beschrieben werden kann.

Sei  $\mathcal{E}_+^{inh}$  eine solche gedämpfte Lösung, die den Randbedingungen genügt. Zusätzlich existiere ein zweites Feld  $\mathcal{E}_-^{inh}$ , das so geschaffen sei, daß die aus diesen beiden Feldern gebildete *Pseudoström*dichte

$$W^{inh}(x) = \mathcal{E}_+^{inh}(x) \partial_x \mathcal{E}_-^{inh}(x) - \mathcal{E}_-^{inh}(x) \partial_x \mathcal{E}_+^{inh}(x)$$

nicht verschwindet und erhalten bleibt. Mit  $\epsilon(x+a) = \epsilon(x)$  bleibt das Gitter translationsinvariant, so daß der Translationsoperator  $\hat{T}_a$  die Felder  $\mathcal{E}_+^{inh}$  und  $\mathcal{E}_-^{inh}$  dabei immer noch um eine Periode  $a$  im Gitter verschiebt. Dabei wird



mit  $\epsilon(x+a) = \epsilon(x)$  auf jeden periodisch angeordneten Streuer ein Absorber gleicher Stärke gesetzt. Mit

$$\hat{\mathbf{T}}_a \mathcal{E}_{\pm}^{inh}(x) = \mathcal{E}_{\pm}^{inh}(x+a) = \lambda_{\pm} \mathcal{E}_{\pm}^{inh}(x)$$

existieren wieder frequenzabhängige Eigenwerte  $\lambda_+$  und  $\lambda_-$ , welche die zu verschiedenen Eigenräumen des Translationsoperators gehörenden Felder  $\mathcal{E}_+^{inh}$  und  $\mathcal{E}_-^{inh}$  periodisch fortsetzen sollen. Da man annimmt, daß mit

$$\partial_x W^{inh}(x) = 0$$

die so gebildete Pseudoströmliche erhalten bleibt, folgt wieder:

$$\hat{\mathbf{T}}_a W^{inh}(x) = W^{inh}(x)$$

oder

$$\lambda_+ \lambda_- = 1 . \quad (3.9)$$

Mit den Lösungen der inhomogenen Wellengleichung ist dies offensichtlich nicht mehr ohne weiteres möglich. Sofern der Eigenraum zum Eigenwert eins des Translationsoperators nicht leer ist, existiert also eine Funktion  $W^{inh}$ , die man durchaus als eine Erhaltungsgröße der Absorption auffassen kann und sich aus zwei unterschiedlichen Eigenfunktionen des Translationsoperators zusammensetzen muß. Das relevante Strahlungsfeld der Absorption in einer speziellen Darstellung des Translationsoperators ist durch  $\mathcal{E}_+^{inh}$  gegeben, welches sich rechts und links von der Quelle aus einer homogenen Lösung konstruieren läßt. In jedem Fall muß ein Eigenwert  $\lambda_+$  innerhalb des Einheitskreises gewählt werden, um die SOMMERFELD-Bedingung bzw. den Abfall im Unendlichen zu gewährleisten und ein Eigenwert  $\lambda_-$  außerhalb des Einheitskreises liegen. Der Pseudoimpuls  $k$  ist so eine komplexe Zahl  $k \in \mathbb{C}$ . Der Translationsoperator besitzt daher im Fall vorhandener Absorption keine unitäre Darstellung mehr und die photonische Bandstruktur muß auf die komplexe Ebene erweitert werden. Was unter einer komplexen Bandstruktur zu verstehen ist, kann an dieser Stelle noch nicht geklärt werden. Nachdem die Quantisierung des Strahlungsfeldes in Abschnitt 6 erfolgt ist, kann in Abschnitt 8 näher auf das dann entstehende komplexe Objekt einer Bandstruktur eingegangen werden.

#### 4. T-MATRIX FORMALISMUS

Für die Wahrscheinlichkeitsaussagen über den Ausgang eines Streuprozesses ist der Zustandsvektor zu einer endlichen Zeit von geringerer Bedeutung. Was wirklich interessiert, ist lediglich der Zusammenhang zwischen den kräftefreien Zuständen am Anfang und am Ende der Wechselwirkung. Unter diesem Gesichtspunkt wird die Streutheorie mit Hilfe der Streumatrix oder S-Matrix neu formuliert. Ein diesem Konzept ähnliches Verfahren ist die Transfermatrix [Pen94], auch T-Matrix genannt. Der Formalismus ist besonders einfach und vorteilhaft bei eindimensionalen Systemen mit einem stückweise konstantem Potential [Mer98],

$$V(x) = \begin{cases} V_0 & : |x| \leq \varepsilon \\ 0 & : |x| > \varepsilon \end{cases} .$$

In diesem Abschnitt soll der Formalismus vorrangig für verlustfreie Systeme eingeführt werden. Das Ziel soll die Beschreibung des unterschiedlichen Reflexionsverhaltens der periodischen Strukturen auf der Grundlage der Symmetrien der T-Matrix sein. Nebenbei interessiert für spätere Anwendungen vor allem ein Ausdruck für den Reflexionskoeffizienten einer in den Halbraum unendlich ausgedehnten, periodischen Struktur (siehe B). Die Absorption spielt dabei zunächst eine untergeordnete Rolle. An gegebener Stelle soll aber trotzdem auf die Absorption eingegangen werden.

##### 4.1. Felder in eindimensionalen, verlustfreien Systemen

Um den *Tunnelprozess* an einer Potentialbarriere zu untersuchen, müssen die Transmissions- und Reflexionskoeffizienten mit Hilfe der Lösung der entsprechenden eindimensionalen, zeitunabhängigen Bewegungsgleichung bestimmt werden. Im Fall der Quantenmechanik wäre diese Bewegungsgleichung die SCHRÖDINGER-Gleichung. Das Konzept der Transfermatrix ist aber allgemeiner und bedarf den Bezug zu einer konkreten Theorie nicht, solange die Bewegungsgleichungen durch eine Form der Wellengleichung gegeben sind. Die Transfermatrix wird dabei allgemein in der Basis der nach rechts bzw. links laufenden Wellen angegeben.

In der Optik könnte die Transfermatrix z.B. die Wechselwirkung mit einer Linse oder einem anderen dispersiven Medium beschreiben. In der Festkörperphysik kann die Transfermatrix verwendet werden, um mit Hilfe des ISING-Modells Ferromagnetismus zu beschreiben, indem die T-Matrix zwei in einer Kette aneinandergereihte Spins miteinander verbindet. Die Natur des Feldes bleibt also unberücksichtigt. Im Fall eindimensionaler Probleme bleibt man auf Skalarfelder beschränkt.

Ziel ist es nun, die Amplituden der einlaufenden und

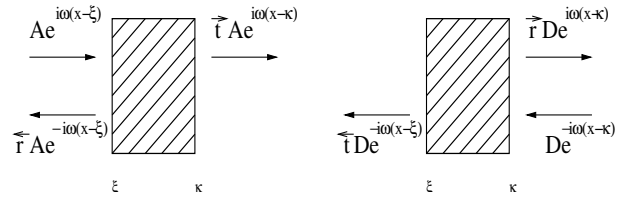


Abbildung 3: Der Streuprozess an einem konstanten Potential kann mit Hilfe der Reflexions- und Transmissionskoeffizienten beschrieben werden. Die Notation der einzelnen Koeffizienten ist in diesem Fall so gewählt, daß die Richtung, in der die jeweiligen Felder in der eindimensionalen Struktur reflektiert bzw. transmittiert werden, durch einen Pfeil gekennzeichnet wird.

auslaufenden Wellen ( $c = 1$ ),

$$\begin{aligned} Ae^{i\omega(x-\xi)} + Be^{-i\omega(x-\xi)} & : x < \xi , \\ Ce^{i\omega(x-\kappa)} + De^{-i\omega(x-\kappa)} & : x > \kappa , \end{aligned}$$

mit Hilfe einer entsprechenden Matrix  $\hat{\mathbf{T}} = \hat{\mathbf{T}}(\xi, \kappa)$  mit

$$\begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} = \hat{\mathbf{T}} \begin{pmatrix} C \\ D \end{pmatrix} \quad (4.1)$$

durch das Potential zu *tunneln*. Die Bestimmung der T-Matrix ist dabei im Idealfall besonders einfach, wenn man berücksichtigt, daß die Felder an den Potentialgrenzen *glatt*, also stetig differenzierbar sein müssen. Der Streuprozess kann dabei auf die relativen Transmissions- und Reflexionskoeffizienten reduziert werden (siehe Abb.3),

$$C = t^{\rightarrow} A + r^{\rightarrow} D , \quad (4.2)$$

$$B = t^{\leftarrow} D + r^{\leftarrow} A , \quad (4.3)$$

wobei die Amplituden für den Spezialfall einer von links einlaufenden Welle ( $A = 1, D = 0$ ) näher konkretisiert werden können,

$$\begin{pmatrix} 1 \\ r^{\leftarrow} \end{pmatrix} = \hat{\mathbf{T}} \begin{pmatrix} t^{\rightarrow} \\ 0 \end{pmatrix} .$$

Die jeweiligen Transmissions- und Reflexionskoeffizienten

$$t^{\rightarrow} = |t^{\rightarrow}| e^{i\phi} , \quad r^{\leftarrow} = |r^{\leftarrow}| e^{i\tau}$$

sind komplexe Zahlen mit Betrag und Phase. Das Gleichungssystem aus (4.2) und (4.3) kann umgeformt werden,

$$\begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} t^{\rightarrow} - r^{\rightarrow} (t^{\leftarrow})^{-1} r^{\leftarrow} & r^{\rightarrow} (t^{\leftarrow})^{-1} \\ -(t^{\leftarrow})^{-1} r^{\leftarrow} & (t^{\leftarrow})^{-1} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} C \\ D \end{pmatrix} , \quad (4.4)$$

so daß man es mit Hilfe der T-Matrix darstellen kann. Für die Reflexions- und Transmissionskoeffizienten erhält man somit:

$$\begin{aligned} r^{\leftarrow} &= -\frac{T_{21}}{T_{22}} , & r^{\rightarrow} &= \frac{T_{12}}{T_{22}} , \\ t^{\leftarrow} &= \frac{1}{T_{22}} , & t^{\rightarrow} &= T_{11} - \frac{T_{21}T_{12}}{T_{22}} . \end{aligned} \quad (4.5)$$

Ist die Bewegungsgleichung zeitungkehrinvariant, so erhält man eine neue Lösung durch komplexe Konjugation,

$$\begin{pmatrix} B^* \\ A^* \end{pmatrix} = \hat{\mathbf{T}} \begin{pmatrix} D^* \\ C^* \end{pmatrix} .$$

Hat man verlustbehaftete Felder mit den Amplituden  $A$ ,  $B$  ist die Eigenschaft der Zeitumkehrinvarianz so ohne weiteres nicht mehr gegeben. Der Grad der Symmetrie der Transfermatrix sinkt damit erheblich. Zwar werden auch die komplex konjugierten Amplituden  $A^*$  und  $B^*$  mit der Transfermatrix  $\hat{\mathbf{T}}$  durch das Potential getunnelt. Es ergibt sich jedoch die Frage, ob man mit  $\hat{\mathbf{T}}$  so auch die komplex konjugierten Lösungen  $C^*$ ,  $D^*$  der gegenüberliegenden Seite des Potentials erhält. Dies kann formal nur durch  $\hat{\mathbf{T}}^*$  erreicht werden.

Da das Potential symmetrisch ist,

$$V(x) = V(-x) ,$$

erhält man ebenfalls eine neue Lösung durch Spiegelung, so daß gilt:

$$\begin{pmatrix} C^* \\ D^* \end{pmatrix} = \hat{\mathbf{T}} \begin{pmatrix} A^* \\ B^* \end{pmatrix}$$

oder

$$\begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} = \hat{\mathbf{T}}_S^* \begin{pmatrix} C \\ D \end{pmatrix} . \quad (4.6)$$

Dabei ist  $\hat{\mathbf{T}}_S$  die sowohl an der Haupt- und Nebendiagonale gespiegelte Transfermatrix  $\hat{\mathbf{T}}$ ,

$$\hat{\mathbf{T}}_S = \begin{pmatrix} T_{22} & T_{21} \\ T_{12} & T_{11} \end{pmatrix} ,$$

mit der Eigenschaft einer inversen Matrix zu  $\hat{\mathbf{T}}$ ,

$$\hat{\mathbf{T}}\hat{\mathbf{T}}_S = \hat{\mathbf{I}} . \quad (4.7)$$

Aus (4.1) und (4.6) folgt:

$$\begin{pmatrix} T_{11} & T_{12} \\ T_{21} & T_{22} \end{pmatrix} = \hat{\mathbf{T}} = \hat{\mathbf{T}}_S^* = \begin{pmatrix} T_{22}^* & T_{21}^* \\ T_{12}^* & T_{11}^* \end{pmatrix}$$

und weiter mit der T-Matrix aus (4.4):

$$\begin{aligned} t^{\rightarrow} - r^{\rightarrow} (t^{\leftarrow})^{-1} r^{\leftarrow} &= [(t^{\leftarrow})^*]^{-1} , \\ \left[ r^{\rightarrow} (t^{\leftarrow})^{-1} \right]^* &= -(t^{\leftarrow})^{-1} r^{\leftarrow} , \end{aligned}$$

wodurch man letztendlich die T-Matrix vereinfachen kann zu

$$\hat{\mathbf{T}} = \begin{pmatrix} [(t^{\leftarrow})^*]^{-1} & r^{\rightarrow} (t^{\leftarrow})^{-1} \\ \left[ r^{\rightarrow} (t^{\leftarrow})^{-1} \right]^* & (t^{\leftarrow})^{-1} \end{pmatrix} . \quad (4.8)$$

Die Identität (4.7) ergibt mit (4.8):

$$\frac{1}{|t^{\leftarrow}|^2} + \frac{(r^{\rightarrow})^2}{(t^{\leftarrow})^2} = 1 , \quad (4.9)$$

$$\frac{(r^{\rightarrow})^*}{[(t^{\leftarrow})^*]^2} + \frac{r^{\rightarrow}}{|t^{\leftarrow}|^2} = 0 . \quad (4.10)$$

Aus (4.10) folgt, daß

$$\frac{(r^{\rightarrow})^*}{(t^{\leftarrow})^*} = -\frac{r^{\rightarrow}}{t^{\leftarrow}} = T_{12}^* = -T_{12}$$

immer eine Imaginärzahl ist,

$$T_{12}^* = -T_{12} \in i\mathbb{R} , \quad (4.11)$$

wodurch mit (4.9),

$$\frac{1}{|t^{\leftarrow}|^2} + \frac{(r^{\rightarrow})^2}{(t^{\leftarrow})^2} = \frac{1}{|t^{\leftarrow}|^2} - \frac{|r^{\rightarrow}|^2}{|t^{\leftarrow}|^2} = 1 , \quad (4.12)$$

die Determinante,

$$\det \hat{\mathbf{T}} = 1 , \quad (4.13)$$

der Transfermatrix immer eins werden muß. Man kann leicht überprüfen, daß der Wert der Determinante an die Erhaltung der Wahrscheinlichkeit gebunden ist. Mit (4.12) und der Spiegelsymmetrie des stückweise konstanten Potentials folgt:

$$|t^{\leftarrow}|^2 + |r^{\rightarrow}|^2 = 1 , \quad (4.14)$$

$$|t^{\rightarrow}|^2 + |r^{\leftarrow}|^2 = 1 , \quad (4.15)$$

die Erhaltung der Wahrscheinlichkeit. Wie bereits in 3.3 vorweggenommen, läßt sich auch für den absorptiven Fall feststellen, daß (4.13) ebenfalls erfüllt wird. Aus der allgemeinen Darstellung der Transfermatrix (4.4) folgt:

$$\det \hat{\mathbf{T}} = \frac{t^{\rightarrow}}{t^{\leftarrow}} . \quad (4.16)$$

Die Forderung  $\lambda_+ \lambda_- = 1$  macht daher durchaus Sinn, denn mit  $t^{\rightarrow} = t^{\leftarrow}$  kann die Umkehrbarkeit des Strahlenganges gesichert werden, woraus sich eine Determinante nach (4.13) ergibt. Dabei wurde vorweggenommen, daß die Transfermatrix mit ihren Eigenwerten  $\lambda_+$ ,  $\lambda_-$  als eine spezielle Darstellung des Translationsoperators interpretiert werden kann. Darauf soll an späterer Stelle noch genauer eingegangen werden (siehe 4.3).

Die Transfermatrix eines symmetrischen, stückweise konstanten Potentials, bei welchem Zeitumkehr erlaubt ist (ohne Absorption), kann somit einfach dargestellt werden,

$$\hat{\mathbf{T}} = \begin{pmatrix} T_{11} & T_{12} \\ -T_{12} & T_{11} \end{pmatrix} , \quad (4.17)$$

wenn Wahrscheinlichkeitserhaltung vorausgesetzt wird. Die Reflexions- und Transmissionskoeffizienten müssen aufgrund der Spiegelsymmetrie nicht mehr bezüglich der Richtungen relativ zum Potential unterschieden werden. Die mit (4.14) und (4.15) eingeführte Wahrscheinlichkeitserhaltung gilt nicht mehr im Fall von Absorption. Dennoch, mit der Einführung der Erhaltungsgröße  $W$ , die in 3.3 formal aus der WRONSKI-Determinante gewonnen wurde, muß die Transfermatrix auch im Fall von Absorption *unimodular* bleiben,

$$\partial_x W(x) = 0 \Rightarrow \det \hat{\mathbf{T}} = 1 . \quad (4.18)$$

#### 4.2. Transfermatrizen als Untergruppe in $SU(1,1)$

Die Transfermatrix ist streng von der Wahl der Basis abhängig. In der Streutheorie werden die Streuprozesse in der Basis der einlaufenden und auslaufenden Wellen relativ zur Potentialbarriere angegeben. Die so gewonnene Transfermatrix  $\hat{\mathcal{S}}$  mit

$$\begin{pmatrix} B \\ C \end{pmatrix} = \hat{\mathcal{S}} \begin{pmatrix} A \\ D \end{pmatrix}$$

führt dann auf den allgemeinen S-Matrix Formalismus. Die gewöhnlichen S-Matrizen können im allgemeinen keine Gruppe bilden, da die einfallenden Amplituden eines Gesamtsystems in dieser Basis nicht mehr aus den einlaufenden Amplituden jedes einzelnen Teilsystems gewonnen werden können. Für die im verlustfreien Fall in (4.8) gefundenen Transfermatrizen kann man sich hingegen leicht davon überzeugen, daß diese eine Gruppe mit der Gruppenstruktur

$$\hat{\mathcal{T}} = \begin{pmatrix} \mathcal{T}_{11} & \mathcal{T}_{12} \\ \mathcal{T}_{12}^* & \mathcal{T}_{11}^* \end{pmatrix} \in SU(1,1) \quad (4.19)$$

bezüglich der Matrixmultiplikation bilden, wenn man bedenkt, daß nach (4.7) auch die Identität die Eigenschaften einer Transfermatrix erfüllt und ein entsprechendes inverses Element aus der Gruppe existiert. Die Identität beschreibt hierbei mit  $r^{\leftarrow} = r^{\rightarrow} = 0$  und  $t^{\leftarrow} = t^{\rightarrow} = 1$  die Wechselwirkung mit einem nicht reflektierenden System ohne Phasenverschiebung bei Transmission. Bringt man also zwei Potentiale zusammen, die zueinander invers sind, erhält man wieder ein transparentes Potential. Man kann entsprechend mit der Basis der Transfermatrizen spielen, und gelangt so zu neuen Gruppenstrukturen<sup>6</sup> mit neuen

<sup>6</sup> Man kann die T-Matrix auch in einer Basis der Wellen und ihrer 1. Ableitungen an zwei verschiedenen Punkten wählen,

$$\begin{pmatrix} \psi(a) \\ \dot{\psi}(a) \end{pmatrix} = \hat{\mathbf{D}} \begin{pmatrix} \psi(b) \\ \dot{\psi}(b) \end{pmatrix} .$$

Die beiden Basisvektoren

$$\begin{pmatrix} \psi(a) \\ \dot{\psi}(a) \end{pmatrix} = \hat{\mathbf{U}} \begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix}$$

sind mit Hilfe der Transformation

$$\hat{\mathbf{U}} = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ ik & -ik \end{pmatrix} \quad (4.20)$$

miteinander verknüpft. Analog erhält man mit (4.17) und (4.20) nach der Ähnlichkeitstransformation:

$$\hat{\mathbf{D}} = \hat{\mathbf{U}} \hat{\mathbf{D}} \hat{\mathbf{U}}^{-1} = \begin{pmatrix} \Re(T_{11} + T_{21}) & k^{-1} \Im(T_{11} - T_{21}) \\ -k \Im(T_{11} - T_{21}) & \Re(T_{11} - T_{21}) \end{pmatrix} .$$

Man kann sich leicht davon überzeugen, daß die Spur und die Determinante bei der Transformation erhalten bleiben, allerdings erhält man jetzt nicht mehr dieselbe Gruppenstruktur wie in (4.19), vielmehr zählen die Transfermatrizen in dieser Darstellung zur Gruppe  $SU(2, \mathbb{R})$  der unimodularen  $2 \times 2$  Matrizen mit reellen Einträgen [Wie99].

Eigenschaften. Da die Gruppenelemente nach (4.19) die spezielle Metrik

$$\hat{\mathbf{M}} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

nach

$$\hat{\mathcal{T}}^T \hat{\mathbf{M}} \hat{\mathcal{T}}^* = \hat{\mathbf{M}}$$

invariant lassen, kann man sie als verallgemeinert unitäre Matrizen auffassen. Nach [Wie99] liegen daher die Transfermatrizen mit (4.13) und (4.17) in der Gruppe der unimodularen  $2 \times 2$  Matrizen  $SU(1,1)$ , die bezüglich der Metrik  $\hat{\mathbf{M}}$  unitär sind. Die Tatsache, daß die Metrik  $\hat{\mathbf{M}}$  invariant bleibt, ist dabei eine andere Formulierung für die Erhaltung der Wahrscheinlichkeit, da in dieser Metrik mit den Amplituden  $A$  und  $B$  der Felder auch

$$(A^* \ B^*) \hat{\mathbf{M}} \begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} = |A|^2 - |B|^2 = \text{const.}$$

erhalten bleibt. Die Darstellung (4.19) kann als eine Verallgemeinerung der Transfermatrizen auf nicht symmetrische, kontinuierliche Potentiale gesehen werden, bei denen der Zusammenhang (4.11) offensichtlich verletzt wird. Es ist also möglich jedes physikalische System, für das eine entsprechende Transfermatrix existiert, in seine Teilsysteme zu zerlegen,

$$\hat{\mathcal{T}}(\xi, \kappa) = \prod_{i,j} \hat{\mathcal{T}}(\tau_i, \tau_j) \quad , \quad \tau_i, \tau_j \in [\xi, \kappa] \quad (4.21)$$

und diese, falls in  $\tau_i$  und  $\tau_j$  ebene Wellen vorliegen, mit Hilfe der entsprechenden kontinuierlichen Untergruppe

$$\mathfrak{T} = \left\{ \hat{\mathcal{T}}(\tau_i, \tau_j) \right\} \subset SU(1,1)$$

der Transfermatrizen zu beschreiben und umgekehrt. Setzt man Stetigkeit der Felder voraus, bilden die Transfermatrizen  $\hat{\mathcal{T}}(\tau_i, \tau_j)$  eine angepasste Liegruppe, die allgemein nicht abelsch ist und durch drei frei wählbare Parameter bestimmt werden kann,

$$\dim \mathfrak{T} = 3 .$$

Einer der Parameter in der Matrixdarstellung (4.19) ist durch die Determinante schon festgelegt.

Die Gruppe  $SU(1,1)$  ist nicht unbekannt. So haben oft quadratische Hamiltonian die Form (4.19) und lassen sich dann, wenn nötig, mit Hilfe der kanonischen BOGOLIUBOV-Transformation diagonalisieren. Es sind daher schon viele verschiedene Möglichkeiten zur Darstellung von (4.19) bekannt. Eine, die sich besonders hervorragend eignet, um die invarianten Untergruppen zu bestimmen, ist die sogenannte IWASAWA-Zerlegung [YMSS01]. Der Dimension der Gruppe entsprechend erfolgt die Faktorisierung dabei mit Hilfe dreier Matrizen,

$$\hat{\mathcal{T}} = \hat{\mathcal{L}}(\phi) \hat{\mathcal{M}}(\rho) \hat{\mathcal{N}}(\nu) ,$$

wobei die Parameter  $\phi$ ,  $\rho$  und  $\nu$  jeweils reelle Zahlen sind, die durch eine entsprechende Transformation der Einträge der Matrix (4.19) näher bestimmt werden können. Da der Wert der Determinante der Elemente in  $SU(1,1)$  mit

$$|S_{11}|^2 - |S_{12}|^2 = 1$$

immer eins bleibt, kann man eine Transformation nach BOGOLIUBOV ansetzen und sucht dann entsprechend nach Zerlegungen, die wieder in  $SU(1,1)$  liegen. Die IWASAWA-Zerlegung erfolgt dabei in einen unitären Operator  $\hat{\mathcal{L}}$ , der ein Element einer kompakten Untergruppe ist, d.h. die Darstellung der Elemente in dieser Untergruppe ist immer diagonalisierbar und deren Eigenwerte haben die Norm eins. Weiterhin findet man einen hermiteschen Operator  $\hat{\mathcal{M}}$  aus einer *maximal* abelschen Untergruppe und einen weiteren Operator  $\hat{\mathcal{N}}$  einer *maximal* nilpotenten Untergruppe.

Die Zerlegung in solche Untergruppen im speziellen Fall von Liegruppen ist immer möglich und eindeutig [CH98]. Für den speziellen Fall eindimensionaler, verlustfreier Systeme mit  $\hat{\mathcal{T}} \in SU(1,1)$  findet man folgende IWASAWA-Zerlegung [YMSS01], [YMSS+02], [YMSSC01]:

$$\hat{\mathcal{L}}(\phi) = \begin{pmatrix} e^{i\phi} & 0 \\ 0 & e^{-i\phi} \end{pmatrix}, \quad \phi \in [-2\pi, 2\pi], \quad (4.22)$$

$$\hat{\mathcal{M}}(\rho) = \begin{pmatrix} \cosh(\rho) & i \sinh(\rho) \\ -i \sinh(\rho) & \cosh(\rho) \end{pmatrix}, \quad \rho \in \mathbb{R}, \quad (4.23)$$

$$\hat{\mathcal{N}}(\nu) = \begin{pmatrix} 1 - \nu & \nu \\ \nu & 1 + \nu \end{pmatrix}, \quad \nu \in \mathbb{R} \quad (4.24)$$

mit

$$\begin{aligned} \phi &= 2 \arg [\mathcal{T}_{11} + i\mathcal{T}_{12}], \\ \rho &= 2 \ln [1 / |\mathcal{T}_{11} + i\mathcal{T}_{12}|], \\ \nu &= 2\Re [\mathcal{T}_{11} (\mathcal{T}_{12})^*] / |\mathcal{T}_{11} + i\mathcal{T}_{12}|^2. \end{aligned}$$

Im Fall eindimensionaler Strukturen hat man also drei kontinuierliche Untergruppen, die für eine bestimmte Klasse von kontinuierlichen Verschiebungen des Feldes in der Struktur stehen. Der Vorteil liegt nun darin, daß man die die Wechselwirkung beschreibenden Transfermatrizen

$$\hat{\mathcal{T}} \in \{ \{ \hat{\mathcal{L}}(\phi) \}, \{ \hat{\mathcal{M}}(\rho) \}, \{ \hat{\mathcal{N}}(\nu) \} \}$$

den Untergruppen zuordnen und damit gleichzeitig bezüglich der unterschiedlichen Eigenschaften klassifizieren kann. Man ist also immer in der Lage mit Hilfe einer geeigneten Ähnlichkeitstransformation mit *Transformationsmatrizen*  $\hat{\mathcal{S}} \in SU(1,1)$  die *konjugierten* Elemente

$$\hat{\mathcal{T}}_C = \hat{\mathcal{S}} \hat{\mathcal{T}} \hat{\mathcal{S}}^{-1}$$

den drei Untergruppen  $\{ \hat{\mathcal{L}}(\phi) \}, \{ \hat{\mathcal{M}}(\rho) \}, \{ \hat{\mathcal{N}}(\nu) \}$  zuzuordnen. Die Darstellung wird dabei durch ihr *Charakter-system* bis auf Äquivalenz bestimmt, d.h. die Spur,

$$\text{Tr} [\hat{\mathcal{T}}_C] = \text{Tr} [\hat{\mathcal{T}}],$$

muß bei der Transformation erhalten bleiben. Die Zerlegung liefert aber nur die Darstellung der einzelnen Gruppenelemente, welche durch die Werte der neuen Parametersätze  $\phi$ ,  $\rho$  und  $\nu$  charakterisiert werden. Man benötigt noch zusätzlich eine neue Gruppenverknüpfung, die jetzt nicht mehr durch die Matrixmultiplikation, sondern, wie es sich für eine Liegruppe gehört, durch eine analytische Funktion der Parametersätze gegeben ist,

$$\hat{\mathcal{T}}(\tau_1) \hat{\mathcal{T}}(\tau_2) = \hat{\mathcal{T}}(f(\tau_1, \tau_2)) \quad , \quad \tau \in \{ \phi, \rho, \nu \} .$$

Allgemein ist diese Verknüpfung nicht eindeutig. In diesem speziellen Fall handelt es sich aber um einparametrische Untergruppen, daher sind sie alle abelsch und man hat<sup>7</sup>:

$$\hat{\mathcal{T}}(\tau_1) \hat{\mathcal{T}}(\tau_2) = \hat{\mathcal{T}}(\tau_1 + \tau_2) \quad , \quad \tau \in \{ \phi, \rho, \nu \} . \quad (4.25)$$

Transfermatrizen in endlichen Systemen mit einem Spurquadrat kleiner als vier zählen zur Untergruppe  $\{ \hat{\mathcal{L}}(\phi) \}$  und sind immer diagonalisierbar. Mit einer Transformationsmatrix  $\hat{\mathcal{S}}$  kann man diese in eine Basis bringen, in der das System frei von Reflexionen erscheint und das Feld lediglich eine globale Phase erhält,

$$\text{Tr} [\hat{\mathcal{T}}]^2 < 4 \Rightarrow r^{\leftarrow} [\hat{\mathcal{T}}_C(\phi)] = 0 .$$

Die optischen Elemente in dieser Gruppe beschreiben daher die Propagation durch ein Medium.

Da  $\cosh(\rho)$  immer größer als eins ist, liegen Transfermatrizen mit einem Spurquadrat größer als vier in  $\{ \hat{\mathcal{M}}(\rho) \}$  und können in eine Basis transformiert werden, in der das Feld zur vollständigen Reflexion neigt und dabei eine Phasenverschiebung um  $\pi/2$  erfährt,

$$\text{Tr} [\hat{\mathcal{T}}]^2 > 4 \Rightarrow \left| r^{\leftarrow} [\hat{\mathcal{T}}_C(\rho)] \right|^2 = \tanh^2(\rho) \rho \stackrel{\rightarrow}{=} \infty .$$

<sup>7</sup> In der Regel kennt man die Funktion  $f$ , die die Verknüpfung beschreibt, zunächst nicht. Man sucht sich meistens statt dessen die Generatoren  $\hat{\mathcal{G}}_i = -i\partial_{\tau_i} \hat{\mathcal{T}}$  in der fundamentalen Darstellung und rechnet damit die Kommutatoren aus. Mit Hilfe der so erhaltenen Liealgebra kann man dann  $f$  bestimmen. Erinnert man sich an den Translationsoperator, so lassen sich alle eindimensionalen infinitesimalen Transformationen auf folgende Form bringen:

$$\hat{\mathcal{T}}(\tau^j) = e^{i\tau^j \hat{\mathcal{G}}_i} .$$

Der Impulsoperator ist dabei der entsprechende Generator infinitesimaler Verschiebungen. Im Fall einparametrischer Transformationen hat man nur einen einzigen Generator  $\hat{\mathcal{G}}$ . Ist der Generator  $\hat{\mathcal{G}}$  hermitesch, so ist die Darstellung unitär. Zur Auswertung der Verknüpfung

$$\hat{\mathcal{T}}(\tau_1) \hat{\mathcal{T}}(\tau_2) = e^{i\tau_1 \hat{\mathcal{G}}} e^{i\tau_2 \hat{\mathcal{G}}} = e^{if(\tau_1, \tau_2) \hat{\mathcal{G}}}$$

kann man die BAKER-HAUSDORF-Formel verwenden,

$$e^{i\tau_1 \hat{\mathcal{G}}} e^{i\tau_2 \hat{\mathcal{G}}} = e^{i(\tau_1 + \tau_2) \hat{\mathcal{G}} + i/2 [\hat{\mathcal{G}}, \hat{\mathcal{G}}] + \dots}$$

und man erhält die gewünschte Verknüpfung (4.25) und die abelsche Eigenschaft.

Nach (4.17) beschreiben die Gruppenelemente in dieser Basis symmetrische Systeme mit reellem Transmissionskoeffizienten und optische Elemente der Totalreflexion.

Ist das Spurquadrat gleich vier, ist die Transfermatrix ein Element der Untergruppe  $\{\hat{\mathcal{N}}(\nu)\}$  mit entsprechender Transmission und einem Reflexionskoeffizienten zwischen null und eins,

$$\text{Tr} [\hat{\mathcal{T}}]^2 = 4 \Rightarrow \left| r^{\leftarrow} [\hat{\mathcal{T}}_C(\nu)] \right|^2 = \frac{\nu^2}{1 + \nu^2} .$$

Der einzelne Punktstreuer, der an späterer Stelle in einem speziellen Modell verwendet werden soll, besitzt eben diese Eigenschaft und ist ein Element dieser Gruppe. In der Gruppe sind daher auch Vertreter *fast* unüberwindbarer Potentiale, für die das Gebiet, in dem das Potential nicht verschwindet, auch auf ein Objekt mit Maß null ( $\varepsilon \rightarrow 0$ ,  $V(x) \rightarrow \infty$ ) begrenzt werden kann.

Die Unterscheidung in diese drei Untergruppen kann man sich nun zu Eigen machen, um die jeweiligen Reflexionskoeffizienten periodischer Strukturen am Beispiel *endlich* und *unendlich* ausgedehnter Systeme zu bestimmen (siehe B). Dabei zeigt sich, daß die Spur einer reduzierten Transfermatrix verwendet werden kann, um Rückschlüsse auf das jeweilige Reflexionsverhalten der *gesamten* Struktur zu ziehen. Mehr noch, sie dient als Kriterium, um die Begriffe Band, Bandlücke und Bandkante zu unterscheiden. Die Transfermatrix muß daher eine übertragene Bedeutung besitzen, die auf die des Translationsoperators hinweist.

### 4.3. Die Gruppe diskreter Translationen

Mit der Eigenschaft (4.21) ist man also in der Lage, mit Hilfe der Transfermatrizen die Wellengleichung auf einem endlichen Gebiet zu lösen und in ein scheinbar unbegrenztes Gebiet beliebig oft fortzusetzen. Um physikalische Lösungen zu erhalten, müssen natürlich die Randbedingungen zur Normierbarkeit und Periodizität in den Matrizen selbst mit berücksichtigt werden. Für die im KRONIG-PENNEY-Modell periodische Anordnung symmetrischer Potentiale mit der Periode  $a$  und  $N$  äquivalenten Einheitszellen, kann man weiterhin die Transfermatrizen, die das Feld jeweils immer um das Vielfache der Periode  $a$  verschieben, als die zweidimensionale Darstellung der Elemente der trivialen, unendlichen Gruppe der diskreten Translationen in einer eindimensionalen,  $\infty$ -periodischen Struktur deuten,

$$\mathfrak{G}(\mathbb{C}) = \left\{ \hat{\mathbf{I}}, \hat{\mathbf{T}}_a, \hat{\mathbf{T}}_a^{-1}, \hat{\mathbf{T}}_a^2, \hat{\mathbf{T}}_a^{-2}, \dots \right\} .$$

Die Gruppe  $\mathfrak{G}$  ist offensichtlich abelsch und führt den unendlichen Kristall in sich selbst über. Zusammen mit der Inversion  $\mathfrak{I}$  erhält man dann die Raumgruppe  $\mathfrak{R}$  des eindimensionalen Kristalls,

$$\mathfrak{R} = \mathfrak{G} \otimes \mathfrak{I} .$$

Weil nach 3.1 der Operator  $\hat{\Theta}_E$  der Wellengleichung die Symmetriegruppe  $\mathfrak{G}$  besitzt,

$$\left[ \hat{\Theta}_E, \hat{\mathbf{T}}_a^n \right] = 0 ,$$

können die Darstellungsräume von  $\mathfrak{G}$  als die Eigenräume des Operators  $\hat{\Theta}_E$  gewählt werden. Diese Aussage ist gleichbedeutend mit dem in 3.1 bereits angeführten BLOCH-Theorem, wonach in einer unendlichen Struktur ohne Absorption alle Einheitszellen einander äquivalent und die Felder in den einzelnen Zellen zueinander proportional sind,

$$\mathcal{E}(x)_{m+1} = \lambda \mathcal{E}(x)_m = \hat{\mathbf{T}}_a \mathcal{E}(x)_m .$$

Der frequenzabhängige BLOCH-Faktor  $\lambda$  stimmt daher mit dem Eigenwert der entsprechenden Transfermatrix der periodischen Struktur überein. Die Eigenwertgleichung nach

$$\det \left[ \hat{\mathbf{T}}_a - \lambda \hat{\mathbf{I}} \right] = 0$$

ergibt mit (4.17) oder direkt aus (4.19) :

$$\lambda_{\pm}^2 - \text{Tr} \left[ \hat{\mathbf{T}}_a \right] \lambda_{\pm} + 1 = 0$$

oder

$$\lambda_{\pm} = \frac{\text{Tr} \left[ \hat{\mathbf{T}}_a \right]}{2} \pm \sqrt{\frac{\text{Tr} \left[ \hat{\mathbf{T}}_a \right]^2}{4} - 1} .$$

Ist das Quadrat der Spur der Transfermatrix größer als vier, erhält man zwei reelle Lösungen,

$$\text{Tr} \left[ \hat{\mathbf{T}}_a \right]^2 > 4 \Rightarrow \lambda_{\pm} \in \mathbb{R} .$$

Wie bereits in 3.1 gezeigt, kann für reelle Eigenwerte keine propagierende Welle existieren, da sie entweder exponentiell wächst oder zerfällt und damit für den Fall verschwindender Absorption keine physikalische Lösung darstellt. Frequenzen in diesem Bereich bilden dann eine Bandlücke. Diese periodische Anordnung absorptionsfreier Streuer führt nach B zu einem Reflexionskoeffizienten von Betrag eins, ein anderer Ausdruck für die unterbundene Ausbreitung der Moden im Medium.

Nur wenn das Quadrat der Spur kleiner als vier ist, sind überhaupt Eigenwerte nach 3.1 mit  $|\lambda|=1$  möglich. Nach B ist bei fehlender Absorption mit einem Reflexionskoeffizienten kleiner als eins eine Ausbreitung innerhalb der periodischen Anordnung der Streuer möglich. Die diesen Eigenwerten zugeordneten Frequenzen stellen damit die eigentliche Bandstruktur dar. Im absorptionsfreien Fall sind damit die Blochmoden durch die Eigenvektoren zu den beiden auf dem Einheitskreis liegenden Eigenwerten  $\lambda_{\pm}$  der die Translation beschreibenden Transfermatrizen  $\hat{\mathbf{T}}_a$  gegeben. Die Darstellung der Blochmoden erfolgt dabei in der Basis ein- und auslaufender, ebener Wellen.

Will man Absorption zulassen, muß für den Translationsoperator nach 3.3 ein Eigenwert  $\lambda_+$  innerhalb des Einheitskreises gewählt werden. Für die im Medium propagierenden, gedämpften Amplituden beschränkt man sich dann auf die Eigenfunktionen dieses Eigenwertes.

Die Bandkanten, welche den Übergang in die Bandlücke kennzeichnen, können durch das Gleichsetzen des Spurquadrates nach

$$\text{Tr} \left[ \hat{\mathbf{T}}_a \right] = \pm 2$$

bestimmt werden. Man erhält also ähnlich der Bandstruktur im Festkörper zwei Bandkanten. Da die Spur für alle Elemente in der Untergruppe  $\{\hat{\mathcal{N}}(\nu)\}$  invariant bleibt, befinden sich alle Elemente mit der Spur identisch zwei in dieser Gruppe und besitzen damit einen Eigenwert eins. In Streuanordnungen, in denen die Translation durch solche Transfermatrizen repräsentiert wird, befindet man sich daher immer auf der Bandkante. Die Phase des BLOCH-Faktors  $\lambda$  verschwindet in diesem Fall. Man darf davon ausgehen, daß auch die Transfermatrizen mit der Spur gleich minus zwei ebenfalls aus den Elementen der Gruppe  $\{\hat{\mathcal{N}}(\nu)\}$  hervorgehen. In einer periodischen Anordnung befindet man sich auch hier auf der Bandkante, jedoch besitzt der BLOCH-Faktor  $\lambda$  in diesem Fall eine feste Phase von  $\pi$ . Für die periodische, absorptionsfreie Struktur besitzen in Übereinstimmung mit B Moden in der Nähe der Bandkante in der Regel einen extrem hohen Reflexionsgrad, der sich im Limes dem der Bandlücke annähert.

Es bleibt anzumerken, daß die in 4.1 und 4.2 getroffenen Aussagen so nur streng für Systeme ohne Absorption gelten, man also nach 3.1 zwei Eigenwerte für den Translationsoperator auf dem Einheitskreis zuläßt. Zeitumkehr ist im Fall von Absorption nicht erlaubt.  $\mathcal{E}_+^{inh}$  und  $(\mathcal{E}_+^{inh})^*$  sind daher Lösungen zweier unterschiedlicher Differentialgleichungen, der Wellengleichung (2.32) und der dazu komplex konjugierten Gleichung. Die Transfermatrix nach 4.1 ist an die Zeitumkehrinvarianz geknüpft und kann nur zur Beschreibung solcher Lösungen der Wellengleichung verwendet werden. Für die Eigenwerte, der in jedem Fall *konstruierten* Transfermatrix, muß nach (4.16)

$$\lambda_+ \lambda_- = 1 .$$

gefordert werden. Die Matrix muß daher auch im Fall von Absorption *unimodular* bleiben, ist aber nicht mehr Element in der in 4.2 vorgestellten Gruppe  $SU(1,1)$ . In der Regel gilt es hier zu prüfen, ob ein Eigenwert innerhalb des Einheitskreises liegt, um sich nach 3.3 auf dessen Eigenfunktion zu beschränken.

Im absorptionsfreien Fall sind die Elemente von  $\mathfrak{G}$  in jedem Fall durch die Gruppenstruktur (4.17) vorgegeben und liegen in  $SU(1,1)$ . Ein Matrixeintrag in (4.17) kann noch einmal durch die Determinante bestimmt werden, so daß man nur noch zwei wählbare Parameter erhält,

$$\dim \mathfrak{G} = 2 .$$

Die Darstellung des Translationsoperators in (4.17) ist offensichtlich nicht unitär. Dazu muß man sich klar machen, daß die Transfermatrizen nur die Darstellung des Translationsoperators für eine ganz bestimmte Klasse von Funktionen sind, nämlich den Lösungen der Wellengleichung. Unitär kann der Translationsoperator nur in einer ganz speziellen Basis sein.

Man kann beweisen, daß es bei endlichen Gruppen und bei der bestimmten Klasse der Liegruppen immer möglich ist, durch eine geeignete Ähnlichkeitstransformation alle Matrizen einer Darstellung unitär zu machen [CH98]. Die durch die Ähnlichkeitstransformation hervorgehenden Darstellungen sind daher zueinander äquivalent. Mit der IWASAWA-Zerlegung der allgemeinen Transfermatrix (4.8) in drei *Lie*untergruppen läßt sich daher auch immer eine entsprechende unitäre Darstellung für  $\mathfrak{G}$  finden, da die diskrete, unendliche Gruppe  $\mathfrak{G}$  immer eine Untergruppe von  $\{\hat{\mathcal{L}}(\phi)\}$ ,  $\{\hat{\mathcal{M}}(\rho)\}$  oder  $\{\hat{\mathcal{N}}(\nu)\}$  zu sein hat<sup>8</sup>. Für den absorptionsfreien Fall ist damit immer gesichert, daß die Eigenwerte auf dem Einheitskreis liegen werden, auch wenn die Darstellung des Translationsoperators nicht unbedingt unitär ist.

#### 4.4. Streuamplituden im Einheitskreis

Alle zur Klärung des Streuprozesses notwendigen Informationen sind bis auf einen globalen Phasenfaktor in den Streuamplituden enthalten. Der Phasenfaktor verschwindet, wenn man anstatt der Amplituden die entsprechenden Amplitudenverhältnisse

$$\mu = \frac{B}{A} \quad , \quad \eta = \frac{D}{C}$$

mit Hilfe der Transfermatrix aufeinander abbildet,

$$\mu = \Phi \left[ \hat{\mathcal{T}}, \eta \right] = \frac{(\mathcal{T}_{12})^* + (\mathcal{T}_{11})^* \eta}{\mathcal{T}_{11} + \mathcal{T}_{12} \eta} . \quad (4.26)$$

Diese *Transferfunktion* [YMSS<sup>+</sup>02] für Transfermatrizen aus  $SU(1,1)$  ist eine bilineare, konforme Abbildung, die die Regionen innerhalb, außerhalb und auf dem Einheitskreis auf sich selbst abbildet bzw. alle diese Regionen

8

$$\begin{pmatrix} \alpha_1 & \beta_1 \\ -\beta_1 & \alpha_1^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha_2 & \beta_2 \\ -\beta_2 & \alpha_2^* \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \alpha_1 \alpha_2 - \beta_1 \beta_2 & \alpha_1 \beta_2 + \beta_1 \alpha_2^* \\ -(\beta_1 \alpha_2 + \alpha_1^* \beta_2) & \alpha_1^* \alpha_2^* - \beta_1 \beta_2 \end{pmatrix}$$

Führt man die Matrixmultiplikation für zwei verschiedene Elemente aus  $SU(1,1)$  mit der Form (4.17) aus, so erkennt man, daß die Nebendiagonalelemente des Produktes mit  $\beta_1, \beta_2 \in \mathbb{R}$  nicht mehr auf der imaginären Achse liegen, sie können daher nicht Elemente derselben Untergruppe sein. Nur wenn  $\alpha_1 = \alpha_2, \beta_1 = \beta_2 \in \mathbb{R}$  erfüllt ist, also für Potenzen der Matrix, ist auch die Nebendiagonale rein imaginär. Die Gruppe  $\mathfrak{G}$  mit der Gruppenstruktur (4.17) bildet also in der Tat eine Untergruppe von  $SU(1,1)$ .

bleiben invariant<sup>9</sup>. Für diese spezielle Form findet man in der Funktionentheorie auch den Begriff der MÖBIUS-Transformation. Eine solche Transformation ist dabei keinesfalls auf Matrizen der Form (4.19) oder (4.17) beschränkt. Genauer gesagt, kann jeder invertierbaren Matrix eine solche Transformation zugeordnet werden, wobei zwei Matrizen dieselbe MÖBIUS-Transformation besitzen, wenn sie sich um einen skalaren Faktor unterscheiden. Die Abbildung der Transfermatrizen aus  $SU(1,1)$  auf die Menge aller MÖBIUS-Transformationen, kann man daher auch als einen *Gruppenhomomorphismus* verstehen [Bus00]. Befindet man sich dabei auf dem Einheitskreis,

$$|\mu| = |r^+| = 1, \quad \eta = 0 = D,$$

für eine von links einlaufende Welle, so wäre dies die Abbildung eines idealen Spiegels. Befindet man sich für eine von links einlaufende Welle im Zentrum des Einheitskreises,

$$|\mu| = |r^-| = 0, \quad \eta = 0 = D,$$

so ist in diesem Fall das Potential transparent. Der eigentliche Streuprozess findet dann zwischen diesen beiden Grenzfällen statt. Die Abbildung (4.26) hat für Transfermatrizen nach (4.19) und (4.17) immer mindestens einen und höchstens zwei Fixpunkte

$$\mu_F = \Phi \left[ \hat{\mathcal{T}}, \mu_F \right].$$

Löst man zur Bestimmung der Fixpunkte die entsprechende quadratische Gleichung, so erhält man als Fixpunkte:

$$\mu_F = -\iota \frac{\Im(\mathcal{T}_{11})}{\mathcal{T}_{12}} \pm \frac{1}{\mathcal{T}_{12}} \sqrt{\text{Tr} \left[ \hat{\mathcal{T}} \right]^2 - 4}. \quad (4.27)$$

Die nach 4.3 angegebenen Spurkriterien können also auch auf die Fixpunkte der Transferfunktion (4.26) angewendet werden.

Mit einem Spurquadrat der Transfermatrix kleiner als vier lassen sich einzelne Streuer dieser Klasse nach 4.2 diagonalisieren. In der entsprechenden Basis hat der Streuer dann den Fixpunkt null und die MÖBIUS-Transformation mit (4.22) kann ermittelt werden zu:

$$\mu = \eta e^{-2\iota\phi}.$$

Man erhält so also zyklische Bahnen um einen elliptischen Fixpunkt innerhalb des Einheitskreises. Für  $|\eta| < 1$  wer-

<sup>9</sup> Da

$$|\mu|^2 = \frac{|\mathcal{T}_{11}|^2 |\eta|^2 + |\mathcal{T}_{12}|^2 + 2\Re[\mathcal{T}_{12}(\mathcal{T}_{11})^*\eta]}{|\mathcal{T}_{11}|^2 + |\mathcal{T}_{12}|^2 |\eta|^2 + 2\Re[\mathcal{T}_{12}(\mathcal{T}_{11})^*\eta]},$$

folgt für die Differenz von Zähler und Nenner:

$$(\det \hat{\mathcal{T}}) (|\eta|^2 - 1) = |\eta|^2 - 1.$$

Also falls  $|\eta| > 1$ , dann  $|\mu| > 1$  und analog in den anderen Fällen.

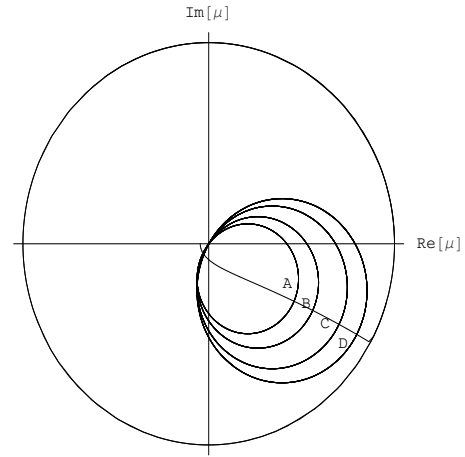


Abbildung 4: Darstellung der Transferfunktion  $\mu_N(\omega a)$  im Einheitskreis für eine von links einlaufende Welle in eine  $N$ -periodische Struktur aus  $\delta$ -Streuern (siehe 5) mit der Periode  $a$  und der Stärke  $\alpha=0.2a$ . Eingezeichnet sind die *Einhüllenden* der Transferfunktionen  $A=\mu_N(0.78 \cdot \pi c)$ ,  $B=\mu_N(0.8 \cdot \pi c)$ ,  $C=\mu_N(0.82 \cdot \pi c)$ ,  $D=\mu_N(0.83 \cdot \pi c)$  sowie zusätzlich die Fixpunktcurve im Intervall  $0 < \omega a/2\pi c < 0.417$ . Je näher der elliptische Fixpunkt dem Einheitskreis kommt, desto stärker oszilliert  $\mu_N(\omega)$  um den Fixpunkt gegen eins, der Reflexionsgrad steigt an. Ist der parabolische Fixpunkt auf dem Einheitskreis erreicht, erhält das System den größtmöglichen Reflexionsgrad. Je weiter man das System ausdehnt, desto weniger Amplituden können in die Struktur transferiert werden, die Bandlücke baut sich auf.

den die Amplituden selbst niemals auf den Einheitskreis abgebildet. Eine Transformation in eine andere Basis mit einer Transformationsmatrix  $\hat{\mathbf{S}} \in SU(1,1)$  bildet den Fixpunkt und die zyklischen Kurven dann wieder *konform* in den Einheitskreis ab.

Mit einem Spurquadrat größer als vier ergibt sich nach (4.26) mit (4.23) für  $\mu$ :

$$\mu = \frac{\eta - \iota \tanh(\rho/2)}{1 + \eta \tanh(\rho/2)}.$$

Die Abbildung ist in diesem Fall hyperbolisch, da man hier zwei Fixpunkte findet. Die invarianten Punkte  $\iota$  und  $-\iota$  liegen hierbei im konkreten Fall auf dem Einheitskreis. Da die beiden einzigen invarianten Punkte auf dem Einheitskreis liegen und die Transferfunktion immer bijektiv ist, muß die Abbildung innerhalb des Einheitskreises durch Bögen erfolgen, die die Fixpunkte miteinander verbinden.

Mit (4.24) erhält man nach

$$\mu = \frac{\eta + (1 + \eta)\nu/2}{1 + (\eta - \iota)\nu/2}$$

einen parabolischen Fixpunkt bei  $\iota$ , der wieder auf dem Einheitskreis liegen muß. Die Abbildung im Einheitskreis kann daher wieder nur durch geschlossene, zyklische Kurven erfolgen, die den Einheitskreis tangieren.



Der Nutzen dieser gesamten Betrachtung liegt in der übergreifenden Bedeutung der MÖBIUS-Transformation als eine alternative Beschreibung des Streuprozesses in einem  $N$ -periodischen Kristall in der komplexen Ebene  $\mathbb{C}$ . Weil die Blochmoden einer  $\infty$ -periodischen Struktur in der Darstellung der ebenen Wellen durch die Eigenvektoren der Transfermatrix  $\hat{\mathcal{T}} = \hat{\mathbf{T}}$  in der durch  $\hat{\mathbf{T}}^N$  mit  $N \rightarrow \infty$  beschriebenen periodischen Struktur gegeben sind, müssen sie mit

$$\eta(\omega) = \Phi \left[ \hat{\mathbf{T}}^N(\omega), \eta(\omega) \right]$$

durch die Fixpunkte der Transferfunktion einer  $N$ -periodischen Struktur ( $N \rightarrow \infty$ ) gegeben sein. Behält man das Bild einer von links einlaufenden Welle bei,

$$\mu_N(\omega) = \Phi \left[ \hat{\mathbf{T}}(\omega), \mu_{N-1}(\omega) \right] = \Phi \left[ \hat{\mathbf{T}}^N(\omega), 0 \right] ,$$

so ist der Einheitskreis mit  $|\mu_N| = 1$  ein Spiegel. Punkte  $\mu_N(\omega)$ , die in Abhängigkeit von der Lage des Fixpunktes die Wirkung des Streuers  $\hat{\mathbf{T}}^N(\omega)$  im Einheitskreis beschreiben und auf einer Linie liegen, die zum Einheitskreis konvergiert ( $N \rightarrow \infty$ ), geben den Weg in das verbotene Band an. Je näher der Fixpunkt dem Einheitskreis kommt, desto kürzer ist der Weg in das verbotene Band.

Nach B oszilliert  $|\mu_N(\omega)| = |r_N^{\leftarrow}(\omega)|$  zwischen null und eins um den Fixpunkt  $\eta(\omega)$  im Einheitskreis. Der Abstand eines Fixpunktes zum Einheitskreis kann daher als ein *geometrisches* Maß für den Reflexionsgrad des endlichen Streuers  $\hat{\mathbf{T}}^N(\omega)$  gesehen werden. Der Abstand zum Ursprung im Einheitskreis ist dabei ein Kennzeichen für die Transparenz der periodischen Anordnung beschrieben durch  $\hat{\mathbf{T}}^N(\omega)$ .

In B wurde weiterhin der Reflexionskoeffizient  $\mathcal{R}$  nach [BH03] mit

$$\mathcal{R}(\omega) = -\frac{(S_{12})^*}{(S_{11})^*}$$

für den rechten, ins Unendliche ausgedehnten Halbraum diskutiert. Da die Transformationsmatrix  $\hat{\mathbf{S}} \in \text{SU}(1,1)$  einer Ähnlichkeitstransformation den Fixpunkt null der diagonalisierten Transfermatrix aus  $\{\hat{\mathcal{L}}(\phi)\}$  auf den die Blochmode repräsentierenden Fixpunkt im Einheitskreis abbildet, ist es in der Tat legitim nach [BH03] und B die Matrix  $\hat{\mathbf{S}}$  im Fall unendlich ausgedehnter Systeme als eine *Transfermatrix* zu verwenden, die ebene Wellen in Blochmoden einer periodischen Anordnung verwandelt. Der Reflexionskoeffizient  $\mathcal{R}(\omega)$  nach (B5) für den Halbraum stimmt dann mit der Transferfunktion  $\mu_\infty(\omega)$  einer von links einlaufenden Welle überein,

$$\text{Tr} \left[ \hat{\mathbf{T}}(\omega) \right] < 4 \quad \Rightarrow \quad \mathcal{R}(\omega) = -\frac{(S_{12})^*}{(S_{11})^*} = \mu_\infty(\omega) .$$

Auf der Bandkante bzw. in der Bandlücke befinden sich die Fixpunkte auf dem Einheitskreis. Die Transformationsmatrix  $\hat{\mathbf{S}}$  bildet diese aufgrund der Konformität immer wieder auf den Einheitskreis ab. Wie in B gezeigt,

ist der Betrag des Reflexionskoeffizienten des Halbraums eins, es existieren keine Moden im Halbraum. Es ergibt sich daher die Frage, ob auch diese Tatsache in der Matrix  $\hat{\mathbf{S}}$  mit  $-(S_{12})^*/(S_{11})^*$  wiederzufinden ist. Aus (B9), (B13) und (4.5) folgt,

$$\text{Tr} \left[ \hat{\mathbf{T}}(\omega) \right] \geq 4 \quad \Rightarrow \quad -\frac{(S_{12})^*}{(S_{11})^*} = \frac{(T_{11})^*}{T_{12}} = \frac{1}{r^{\leftarrow}} .$$

Weil  $\hat{\mathbf{T}}$  eine Transfermatrix ist, kann mit  $-(S_{12})^*/(S_{11})^*$  das Inverse ihres Reflexionskoeffizienten  $r^{\leftarrow}$  angegeben werden. Insbesondere folgt mit (4.26):

$$\frac{1}{r^{\leftarrow}} = \frac{(T_{11})^*}{T_{12}} = \Phi \left[ \hat{\mathbf{T}}, \infty \right] .$$

Da das Äußere des Einheitskreises mit (4.26) auf sich selbst abgebildet wird, ist damit  $r^{\leftarrow} < 1$  erfüllt. Weiterhin kann es für  $D/C = \infty$  keine in den rechten Halbraum propagierende, von links einlaufende Welle mit  $C = 0$  geben, man befindet sich in der Bandlücke.

## 5. DER $\delta$ -STREUER

Der photonische Kristall oder ein einfaches Gitter ist per Definition kein homogenes Medium mehr. Die Inhomogenität in periodischen Systemen wird dem KRONIG-PENNEY-Modell und den experimentellen Möglichkeiten entsprechend, durch homogene Dünnschichtsysteme in ein-, zwei- oder dreidimensionalen Strukturen realisiert. Dies sind makroskopische Streuer, deren frequenzabhängige Dielektrizitätsfunktion erneut durch ein Modell nach DRUDE oder anderen eingeführt wird. Eine andere Möglichkeit ist die Realisierung der Inhomogenität durch Punktstreuer, deren *Stärke* durch die frequenzabhängige Polarisierbarkeit  $\alpha(\omega)$  gegeben wird. Da die Endlichkeit eines Systems die Periodizität verletzt, wird sich im Folgenden auf den unendlich ausgedehnten Fall periodisch angeordneter Punktstreuer mit gleicher Stärke  $\alpha_m = \alpha$  beschränkt und die Transfermatrix der Punktstreuer als Translationsoperator verwendet.

Klassisch beschreibt die Polarisierbarkeit die Proportionalitätskonstante zwischen dem *lokalen* Feld am Streuer und dem daraus resultierenden Dipolmoment. Die Dipolmomentdichte  $P(x, \omega)$  aller Punktstreuer in einer eindimensionalen,  $\infty$ -periodischen Struktur ist damit gegeben durch

$$\begin{aligned} P(x, \omega) &= \sum_{m=-\infty}^{\infty} \alpha(\omega) \mathcal{E}_{lok}(x, \omega) \delta(x - ma) \\ &= [\epsilon(x, \omega) - 1] \mathcal{E}(x, \omega) . \end{aligned}$$

In einer eindimensionalen, unendlich ausgedehnten Struktur spielt die Unterscheidung zwischen lokalem und nicht lokalem Feld nur eine untergeordnete Rolle, so daß man für die *relative* Dielektrizitätsfunktion

$$\epsilon(x, \omega) = 1 + \sum_{m=-\infty}^{\infty} \alpha(\omega) \delta(x - ma) \quad (5.1)$$

erhält. Auf diese Weise wird mit Hilfe der  $\delta$ -Streuer die makroskopische Dielektrizitätsfunktion direkt mit der mikroskopischen Polarisierbarkeit verknüpft. Die Polarisierbarkeit muß dabei den KRAMERS-KRONIG-Beziehungen (2.15) und (2.16) genügen. Mit (2.18) muß  $\Im[\alpha(\omega)] > 0$  gelten.

### 5.1. Die Bandstruktur im Punktstreuermodell

Das Verhalten der *Wellenfunktionen* mit einem Vakuumhintergrund rechts und links von der Unstetigkeitsstelle ( $c = \mu_0 = 1$ ),

$$Ae^{i\omega x} + Be^{-i\omega x} : x < 0 , \quad (5.2)$$

$$Ce^{i\omega x} + De^{-i\omega x} : x > 0 , \quad (5.3)$$

erhält man, indem die Wellengleichung

$$\partial_x^2 \mathcal{E}(x, \omega) + \epsilon(x, \omega) \omega^2 \mathcal{E}(x, \omega) = -\omega j_N(x, \omega)$$

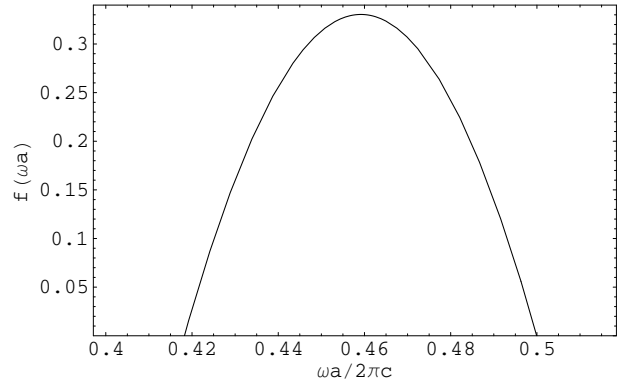


Abbildung 5: Graphische Darstellung der Funktion  $f(\omega a) = \text{Tr}[\hat{\mathbf{T}}_\delta]^2 - 4$  mit der Spur (5.6) der Transfermatrix (5.5) ohne Absorption,  $\alpha = 0.2a$ . In dem Bereich  $0 \leq \omega a / 2\pi c \leq 0.6$  ergeben sich zwei Bandkanten, eine bei  $\omega a / 2\pi c = 0.417$  und eine bei  $\omega a / 2\pi c = 0.5$ . Die Bandlücke liegt damit im Bereich  $0.417 < \omega a / 2\pi c < 0.5$ .

mit der Dielektrizitätsfunktion (5.1) über eine Strecke integriert wird, die die Unstetigkeitsstelle  $ma$  umfaßt. Wenn man versucht, mit einer stetigen Wellenfunktion und einer stetigen bzw. *integrierbaren* Rauschpolarisation auszukommen, verschwindet bei immer kleiner werdendem Integrationsgebiet das Integral über die Rauschstromdichte,

$$\int_{ma-0}^{ma+0} dx j_N(x, \omega) \longrightarrow 0 .$$

Mit der in (2.36) festgelegten Rauschstromdichte  $j_N$  und einem gemeinen  $\delta$ -Streuer kann diese Bedingung nicht mehr ohne weiteres vorausgesetzt werden, da noch nicht klar ist, was unter dem mit (5.1) in (2.36) auftauchenden Funktional konkret zu verstehen ist. Auf dieses Problem soll an späterer Stelle eingegangen werden. Es sei daher nur erwähnt, daß es durchaus eine Möglichkeit gibt, die Rauschpolarisation so zu formulieren, daß sie integrierbar bleibt und damit auch die Transfermatrix allgemein für den absorptiven Fall konstruiert werden kann. Speziell für  $ma = 0$  lauten die Grenzbedingungen somit:

$$\partial_x \mathcal{E} |_{+0} - \partial_x \mathcal{E} |_{-0} = -\omega^2 \alpha \mathcal{E}(0, \omega) ,$$

$$\mathcal{E}_{+0} = \mathcal{E}_{-0} = \mathcal{E}(x, \omega) ,$$

d.h. die Wellenfunktion ist stetig, aber sie hat einen *Knick* nach Maßgabe von  $\alpha(\omega)$ . Diese Grenzbedingungen stellen ein sehr bequemes Mittel dar, um die Beeinflussung der Wellenfunktion durch dünne, aber sehr hohe durch den  $\delta$ -Streuer realisierte Potentialschwellen einfach zu erfassen. Indem man das entstehende Gleichungssystem nach einlaufenden und auslaufenden Amplituden ordnet, findet man nach kurzer Rechnung mit dem Ansatz (5.2) und

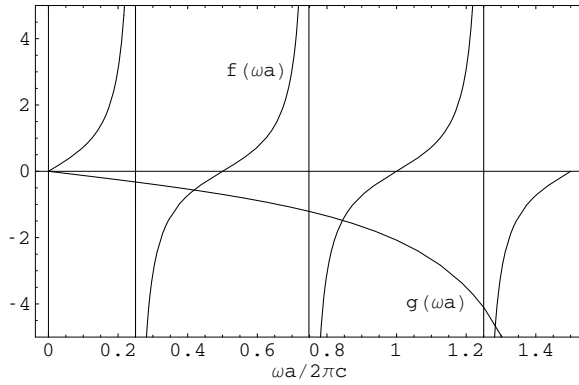


Abbildung 6: Graphische Darstellung der Funktion  $f(\omega a) = \tan(\omega a)$  und  $g(\omega a) = 4\omega a / ((\omega a)^2 - 4)$  im Intervall  $0 < \omega a / 2\pi c < 1.5$  für  $\alpha = 0.2a$ . Die Nullstellen von  $f$  sind die unteren, von der Polarisierbarkeit unabhängigen Bandkanten, die Schnittpunkte  $f=g$  die oberen, von der Polarisierbarkeit abhängigen Bandkanten.

(5.3) die Transfermatrix

$$\hat{\mathbf{T}}_\delta = \begin{pmatrix} 1 - \frac{i\alpha\omega}{2} & -\frac{1}{2}i\alpha\omega \\ \frac{1}{2}i\alpha\omega & 1 + \frac{i\alpha\omega}{2} \end{pmatrix} \quad (5.4)$$

für den  $\delta$ -Streuer. Für Schmalbandfelder mit  $\alpha \in \mathbb{R}$  erfüllt die Transfermatrix (5.4) mit (4.17) die Gruppenstruktur eines symmetrischen Potentials und ist unimodular. Sie ist damit ein Element der Gruppe  $SU(1,1)$ . Die Spur in (5.4) ergibt zwei, damit ist die Transfermatrix ein Element der Untergruppe  $\{\tilde{\mathcal{N}}(\nu)\}$  aus 4.2. Der durch diese Transfermatrix realisierte Translationsoperator ist offensichtlich ungeeignet, um periodische Strukturen mit  $\delta$ -Streuer zu beschreiben. Die Periodizität muß Bestandteil der Transfermatrix sein. Im Ansatz (5.2) und (5.3) ist daher die Periode  $a$  als zusätzliche Phase zu berücksichtigen. Eine mit der Transfermatrix (5.4) realisierte periodische Anordnung von  $\delta$ -Streuern hätte die Periode  $a = 0$ . Die einzigen erlaubten, wenn auch unmöglichen Moden lägen genau auf der Bandkante im Unendlichen.

Unterteilt man das System mit der Periode  $a$  in unendlich viele Einheitszellen mit

$$\mathcal{E}_m = \mathcal{E}_m(x, \omega) = a_m e^{i\omega(x-ma)} + b_m e^{-i\omega(x-ma)}$$

für

$$(m-1)a < x < ma, \quad m \in \{0, \mathbb{Z}\}$$

und den modifizierten Grenzbedingungen

$$\partial_x \mathcal{E} |_{ma+0} - \partial_x \mathcal{E} |_{ma-0} = -\omega^2 \alpha \mathcal{E}(ma, \omega),$$

$$\mathcal{E}_{m-1}(ma, \omega) = \mathcal{E}_m(ma, \omega),$$

QED in periodischen und absorbierenden Medien

so erhält man als Transfermatrix:

$$\hat{\mathbf{T}}_\delta = \begin{pmatrix} e^{i\omega a} \left(1 + i\frac{\alpha\omega}{2}\right) & i e^{-i\omega a} \frac{\alpha\omega}{2} \\ -i e^{i\omega a} \frac{\alpha\omega}{2} & e^{-i\omega a} \left(1 - i\frac{\alpha\omega}{2}\right) \end{pmatrix}. \quad (5.5)$$

Mit Hilfe dieser Transfermatrix wird das Feld aus der linken Ecke einer Einheitszelle vom Streuer  $(m-1)a$  in die linke Ecke der nächsten Einheitszelle des Streuers  $ma$  verschoben,

$$\hat{\mathbf{T}}_\delta \begin{pmatrix} a_{m-1} \\ b_{m-1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_m \\ b_m \end{pmatrix}.$$

Auch die Transfermatrix (5.5) liegt in  $SU(1,1)$  und tunnelt das Feld durch ein symmetrisches Potential falls  $\alpha \in \mathbb{R}$ , allerdings ist die Inverse zu (5.5) nicht mehr durch  $(\hat{\mathbf{T}}_\delta)_S$  gegeben, da durch die Berücksichtigung der Periode durch eine zusätzliche Phase der Grad der Symmetrie in (5.5) verringert wird ( $T_{12}, T_{21} \notin i\mathbb{R}$ ). Die Spur ist gegeben durch

$$\text{Tr} [\hat{\mathbf{T}}_\delta] = 2 \cos(\omega a) - \omega \alpha \sin(\omega a). \quad (5.6)$$

Nach 4.3 können damit die Bandkanten in der durch Blochmoden gegebenen Bandstruktur eines  $\infty$ -periodischen Systems mit der Periode  $a$  bestimmt werden. Mit (5.6) wird für  $\omega a = (n-1)\pi$  das Spurquadrat immer vier,

$$\omega_B a = (n-1)\pi, \quad n \in \mathbb{N} \quad \Rightarrow \quad \text{Tr} [\hat{\mathbf{T}}_\delta]^2 = 4. \quad (5.7)$$

Man findet also immer eine untere Bandkante, die unabhängig von der Polarisierbarkeit  $\alpha$  ist und die Periode  $\pi/a$  besitzt. Nach leichtem Umformen von  $\text{Tr} [\hat{\mathbf{T}}_\delta]^2 - 4 = 0$  findet man für die obere, von der Polarisierbarkeit abhängige Bandkante:

$$\tan(\omega_B a) = \frac{4\omega_B \alpha}{(\omega_B a)^2 - 4}. \quad (5.8)$$

Mit (5.8) vergrößert sich allgemein die Bandlücke mit zunehmender Dispersion und verkleinert sich mit einer immer größer werdenden Periode  $a$  der periodischen Struktur. Im Grenzfall  $\omega \alpha \rightarrow \infty$  fallen obere und untere Bandkante zusammen, so daß mit zunehmender Bandnummer die Bänder immer schmaler werden müssen (siehe Abb.6). Mit (5.5) kann man überprüfen, daß

$$\det \hat{\mathbf{T}}_\delta = 1$$

erfüllt wird, unabhängig davon, ob Absorption erlaubt ist. Damit muß aber auch  $\lambda_+ \lambda_- = 1$  gelten. Im verlustfreien Fall ist somit nach 4.1 die Wahrscheinlichkeitserhaltung gesichert, mehr noch, die Eigenwerte liegen beide auf dem Einheitskreis. Ist Absorption erlaubt, so ist nach 4.1 die Bedingung  $\lambda_+ \lambda_- = 1$  über den Begriff der Wahrscheinlichkeit hinaus eine einfache Forderung nach der

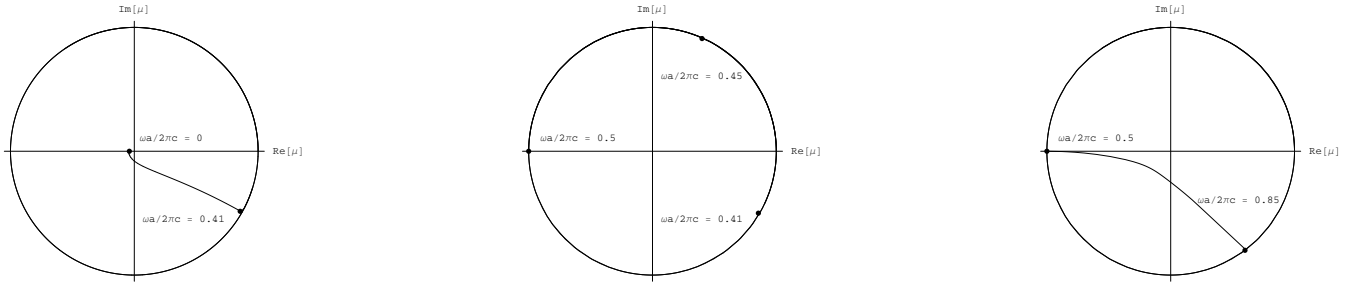


Abbildung 7: Frequenzparametrisierte Transferfunktion  $\mu_N = \Phi[\hat{\mathbf{T}}_\delta^N, \eta]$  des Streuers  $\hat{\mathbf{T}}_\delta^N$  mit dem Translationsoperator  $\hat{\mathbf{T}}_\delta$  gegeben durch (5.5) und  $N \rightarrow \infty$  bei einer Dispersion  $\alpha = 0.2a$ . Von links nach rechts: Abbildung der frequenzparametrisierten Fixpunktcurven (Blochmoden) der Transferfunktion innerhalb des Einheitskreises im Intervall  $0 < \omega a/2\pi c < 0.417$ ,  $0.42 < \omega a/2\pi c < 0.5$ ,  $0.5 < \omega a/2\pi c < 0.85$ .

Umkehrbarkeit des Strahlenganges. In jedem Fall erfüllt der  $\delta$ -Streuer diese Bedingung. Für die Eigenwerte von (5.5) findet man:

$$\lambda_{\pm} = \frac{1}{2} \text{Tr} [\hat{\mathbf{T}}_\delta] \pm \frac{i}{2} \sin(\omega a) \sqrt{4 + 4\omega\alpha \cot(\omega a) - (\omega\alpha)^2}, \quad (5.9)$$

wobei für  $\lambda_+$  das Vorzeichen der Wurzel so gewählt wurde, daß  $\lambda_+$  für  $\alpha \in \mathbb{C}$  im Einheitskreis und für  $\Im(\alpha) \rightarrow 0$  auf dem Einheitskreis liegt. Die Blochmoden sind nach 4.3 im  $\infty$ -periodischen System durch die Eigenvektoren der Transfermatrix zu den jeweiligen Eigenwerten gegeben. Im Fall von Absorption  $\Im(\alpha) > 0$  müssen die propagierenden Amplituden Eigenvektoren zum Eigenwert  $\lambda_+$  sein, wenn das Feld die entsprechenden Randbedingungen im Unendlichen erfüllen soll.

## 5.2. Der Halbraum aus periodisch angeordneten Punktstreuern

Für eine im rechten Halbraum unendlich ausgedehnte periodische Anordnung von  $\delta$ -Streuern kann nach (B5) der Reflexionskoeffizient  $\mathcal{R}$  ermittelt werden. In Übereinstimmung mit [BH03] kann (B5) für einen  $\delta$ -Streuer vereinfacht werden zu

$$\mathcal{R} = \frac{e^{i\omega a} - \lambda_+}{e^{i\omega a} \lambda_+ - 1}. \quad (5.10)$$

Dabei ist zu beachten, daß in [BH03] eine Anordnung der Punktstreuer in den rechten Halbraum  $x \geq -a/2$  durch

$$\epsilon(x, \omega) = 1 + \sum_{m=0}^{\infty} \alpha(\omega) \delta \left[ x - \left( m - \frac{1}{2} \right) a \right]$$

vorausgesetzt wird. Die so gewonnene Transfermatrix für den  $\delta$ -Streuer unterscheidet sich von (5.5). Bei Verwendung von (5.10) in dem Modell nach (5.1) gilt es daher eine zusätzliche Phase  $-\omega a/2$  zu berücksichtigen.

Weil die Blochmoden die invarianten Punkte der Transferfunktion sind, geben mit

$$\mu(\omega a) = \eta(\omega a) = \Phi \left[ \hat{\mathbf{T}}_\delta(\omega a), \eta(\omega a) \right]$$

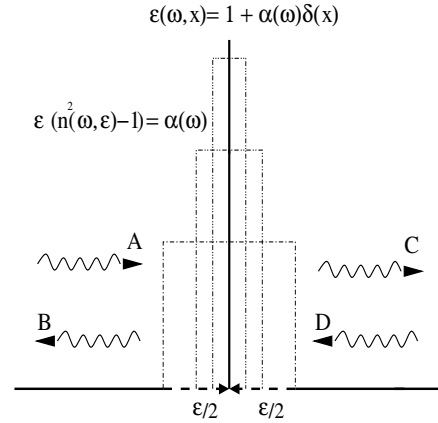


Abbildung 8: Der Brechungsindex eines Punktoberjekts ist schon in der klassischen Elektrodynamik nicht definierbar, da  $n(\omega)$  eine rein makroskopische Größe ist. Felder mit einer entsprechend großen Wellenlänge relativ zur Ausdehnung  $\epsilon$  der Schwelle nehmen den Unterschied zwischen einer Potentialschwelle und einem Punktoberjekt mit Maß null aber nur bedingt wahr, so daß man sehr wohl in der Lage ist in diesem Grenzfall auch ein Modell mit Punktstreuern zu verwenden.

die Fixpunktcurven der Transferfunktion in Abb.7 das Reflexionsverhalten der durch periodische  $\delta$ -Streuer angeordnete Struktur im Halbraum wieder. Die Konvergenz der frequenzparametrisierten Fixpunktcurven zum Ursprung ist dabei ein Maß für den steigenden Transmissionsgrad, die Konvergenz zum Einheitskreis ein Maß für den steigenden Reflexionsgrad aller Streuer in der  $\infty$ -periodischen Struktur.

Mit dem Intervall  $0 < \omega a/2\pi c < 0.417$  werden nach Abb.5 und Abb.6 die Frequenzen des ersten Bandes durchlaufen. Für kleine Frequenzen in diesem Band ist das die Streuer repräsentierende Potential  $\lim_{N \rightarrow \infty} \hat{\mathbf{T}}_\delta^N$  stark transparent. Mit zunehmender Frequenz nähert man sich dem Einheitskreis bzw. der Bandkante. Der Reflexionsgrad nimmt daher stetig zu.

Innerhalb der Bandlücke,  $0.42 < \omega a/2\pi c < 0.5$ , findet keine Abbildung innerhalb des Einheitskreises statt. Die

Fixpunktkurve für dieses Intervall liegt vollständig auf dem Einheitskreis, es existieren daher keine Blochmoden innerhalb der  $\infty$ -periodischen Struktur.

Erst beim Verlassen der Bandlücke bzw. beim Übergang in das nächste Band mit  $0.42 < \omega a/2\pi c < 0.5$  verläßt die Fixpunktkurve den Einheitskreis, so daß der Reflexionsgrad zunächst langsam abnimmt, um dann ungefähr in der Mitte des Bandes wieder anzusteigen bis die nächste Bandkante erreicht wird.

Für immer höher werdende Frequenzen der folgenden Bänder entfernt sich die Kurve nach dem Verlassen des Einheitskreises immer mehr vom Ursprung des Einheitskreises, so daß die Bänder im Ganzen immer schmaler werden, bis keine propagierenden Moden im Grenzfall hoher Frequenzen mehr existieren können. Dasselbe Ergebnis erhält man ebenfalls bei Vergrößerung der Dispersion  $\alpha$ .

### 5.3. Zum Punktstreuer und der Potentialschwelle

Die Einführung eines Punktstreuers als ein Objekt mit Maß null führt also durchaus zu zweckdienlichen Ergebnissen, allerdings ist die Dielektrizitätsfunktion (5.1) nur im Sinne einer verallgemeinerten Funktion gültig. Makroskopische, periodische Materialien können nur durch endliche Potentialschwellen beschrieben werden. Es ist daher notwendig festzustellen, wie schmal eine endliche Potentialschwelle sein darf, um durch einen  $\delta$ -Streuer der Stärke  $\alpha$  ersetzt werden zu können und umgekehrt. Dazu befinde sich eine Potentialschwelle der Ausdehnung  $\varepsilon$  und Dispersion  $\epsilon(\omega) = n^2(\omega) \in \mathbb{R}$  im Vakuum. Berücksichtigt man die Tatsache, daß der Brechungsindex  $n(\omega)$  in der Wellengleichung quadratisch auftaucht, so ergibt sich als Lösungsansatz für das Gebiet links und rechts der Schwelle:

$$\mathcal{E}_{-1}(x) = a_{-1}e^{i\omega x} + b_{-1}e^{-i\omega x} \quad : \quad x < -\frac{\varepsilon}{2},$$

$$\mathcal{E}_0(x) = a_0e^{i\omega n(\omega)x} + b_0e^{-i\omega n(\omega)x} \quad : \quad -\frac{\varepsilon}{2} < x < \frac{\varepsilon}{2},$$

$$\mathcal{E}_1(x) = a_1e^{i\omega x} + b_1e^{-i\omega x} \quad : \quad x > \frac{\varepsilon}{2}.$$

Die Felder sollen stetig differenzierbar sein, daraus erhält man als Grenzbedingungen:

$$\mathcal{E}_{\pm 1}\left(\pm\frac{\varepsilon}{2}\right) = \mathcal{E}_0\left(\pm\frac{\varepsilon}{2}\right), \quad \partial_x \mathcal{E}_{\pm 1}\left(\pm\frac{\varepsilon}{2}\right) = \partial_x \mathcal{E}_0\left(\pm\frac{\varepsilon}{2}\right).$$

Die Grenzen  $x = \pm\varepsilon/2$  der Potentialschwelle stellen ebene Trennflächen zweier Dielektrika dar, dem Vakuum mit Brechungsindex eins und einer dünnen Schicht mit Brechungsindex  $n(\omega)$ . Um die Transfermatrix der Schwelle zu bestimmen ist es daher nötig, zunächst einen Operator  $\hat{\mathbf{T}}_{\square}^L$ ,

$$\begin{pmatrix} a_{-1} \\ b_{-1} \end{pmatrix} = \hat{\mathbf{T}}_{\square}^L \begin{pmatrix} a_0 \\ b_0 \end{pmatrix},$$

zu konstruieren, der die Amplituden der Felder aus dem Medium mit Brechungsindex  $n(\omega)$  in das Vakuum entläßt

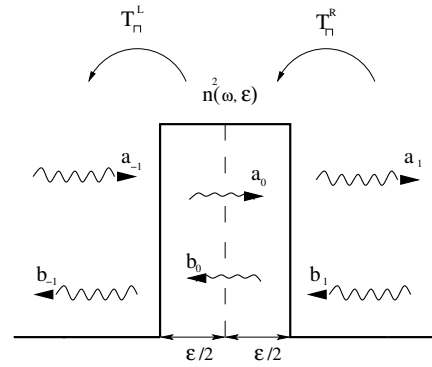


Abbildung 9: Prinzipskizze zur Einführung der Transporter  $\hat{\mathbf{T}}_{\square}^L$  und  $\hat{\mathbf{T}}_{\square}^R$  an einer Trennschicht einer endlichen Potentialschwelle der Ausdehnung  $\varepsilon$ . Dehnt man die Schwelle in den linken oder rechten Halbraum aus, so daß eine Stufe entsteht, kann man aus  $\hat{\mathbf{T}}_{\square}^L$  und  $\hat{\mathbf{T}}_{\square}^R$  die FRESNEL-Formeln gewinnen.

und einen Operator  $\hat{\mathbf{T}}_{\square}^R$ , der die Feldamplituden aus dem Vakuum in das Medium transportiert,

$$\begin{pmatrix} a_0 \\ b_0 \end{pmatrix} = \hat{\mathbf{T}}_{\square}^R \begin{pmatrix} a_1 \\ b_1 \end{pmatrix}.$$

Die Schwelle besitzt eine Spiegelsymmetrie, daher spielt die Richtung der auf die Trennflächen senkrecht einfallenden Wellen keine Rolle.  $\hat{\mathbf{T}}_{\square}^R$  und  $\hat{\mathbf{T}}_{\square}^L$  müssen ebenfalls dieser Spiegelsymmetrie folgen und sind daher bezüglich der Richtungen der einlaufenden Wellen im Vakuum austauschbar,

$$\begin{pmatrix} a_0 \\ b_0 \end{pmatrix} = \left(\hat{\mathbf{T}}_{\square}^R\right)_S \begin{pmatrix} a_{-1} \\ b_{-1} \end{pmatrix}$$

oder

$$\left(\hat{\mathbf{T}}_{\square}^R\right)_S \hat{\mathbf{T}}_{\square}^L = \hat{\mathbf{I}}. \quad (5.11)$$

Die Wellen sollen daher immer relativ zum Zentrum der Schwelle links einfallen und rechts wieder auslaufen. Mit den Lösungsansätzen  $\mathcal{E}_1$ ,  $\mathcal{E}_0$ ,  $\mathcal{E}_{-1}$  und den zugehörigen Grenzbedingungen findet man für die *Transporter* aus dem und in das Medium:

$$\hat{\mathbf{T}}_{\square}^L = \begin{pmatrix} e^{-i\varepsilon(n-1)\omega/2} \frac{(n+1)}{2} & -e^{i\varepsilon(n+1)\omega/2} \frac{(n-1)}{2} \\ -e^{-i\varepsilon(n+1)\omega/2} \frac{(n-1)}{2} & e^{i\varepsilon(n-1)\omega/2} \frac{(n+1)}{2} \end{pmatrix}, \quad (5.12)$$

$$\hat{\mathbf{T}}_{\square}^R = \begin{pmatrix} e^{-i\varepsilon(n-1)\omega/2} \frac{(n+1)}{2n} & e^{-i\varepsilon(n+1)\omega/2} \frac{(n-1)}{2n} \\ e^{i\varepsilon(n+1)\omega/2} \frac{(n-1)}{2n} & e^{i\varepsilon(n-1)\omega/2} \frac{(n+1)}{2n} \end{pmatrix}. \quad (5.13)$$

Beide besitzen die Symmetrie einer Transfermatrix nach (4.19). Da  $\det \hat{\mathbf{T}}_{\square}^L = n$  bleibt mit  $\det \hat{\mathbf{T}}_{\square}^R = 1/n$  die Wahrscheinlichkeit nach (5.11) erhalten.

Aus (5.12) und (5.13) ergibt sich mit (4.5) für den Reflexionskoeffizienten für die Propagation vom linken in den rechten Halbraum und den Transmissionskoeffizienten für die Propagation vom rechten in den linken Halbraum:

$$r_{\square}^{L\leftarrow} = \frac{n-1}{n+1} e^{-i\varepsilon n\omega} \quad , \quad t_{\square}^{R\leftarrow} = \frac{2n}{n+1} e^{-i\varepsilon(n-1)\omega/2} \quad .$$

Diese stimmen mit den FRESNEL-Formeln [Jac02] zur

---


$$\hat{\mathbf{T}}_{\square} = \begin{pmatrix} \frac{-e^{i\varepsilon(1+n)\omega}(n-1)^2 + e^{-i\varepsilon(n-1)\omega}(n+1)^2}{4n} & -i \sin(\varepsilon n\omega) \frac{(n^2-1)}{2n} \\ i \sin(\varepsilon n\omega) \frac{(n^2-1)}{2n} & \frac{-e^{-i\varepsilon(1+n)\omega}(n-1)^2 + e^{i\varepsilon(n-1)\omega}(n+1)^2}{4n} \end{pmatrix} \quad . \quad (5.14)$$


---

Die Transfermatrix in (5.14) mit

$$\begin{pmatrix} a_{-1} \\ b_{-1} \end{pmatrix} = \hat{\mathbf{T}}_{\square} \begin{pmatrix} a_1 \\ b_1 \end{pmatrix}$$

besitzt, wie zu erwarten, die Symmetrie einer Transfermatrix eines symmetrischen Potentials nach (4.17), wobei immer ein rein dispersives Medium mit  $n(\omega) \in \mathbb{R}$

Reflexion und Brechung elektromagnetischer Wellen an der ebenen Trennfläche zweier Dielektrika für Felder mit senkrechtem Einfall überein. Da sich die jeweilige Trennschicht nicht im Ursprung befindet, ist im Gegensatz zu [Jac02] eine zusätzliche Phase zu berücksichtigen. Für die Transfermatrix  $\hat{\mathbf{T}}_{\square} = \hat{\mathbf{T}}_{\square}^L \hat{\mathbf{T}}_{\square}^R$  der Schwelle erhält man mit  $\hat{\mathbf{T}}_{\square}^L$  und  $\hat{\mathbf{T}}_{\square}^R$  aus (5.12) und (5.13):

$$\hat{\mathbf{T}}_{\square} = \hat{\mathbf{T}}_{\square}(\varepsilon^0) + \hat{\mathbf{T}}_{\square}(\varepsilon^1) + \hat{\mathbf{T}}_{\square}(\varepsilon^2) + \dots \quad .$$

Die Entwicklung bis zur zweiten Ordnung in  $\varepsilon$  ergibt:

$$\hat{\mathbf{T}}_{\square} = \begin{pmatrix} 1 - i \frac{\varepsilon\omega(n^2-1)}{2} & -i \frac{\varepsilon\omega(n^2-1)}{2} \\ i \frac{\varepsilon\omega(n^2-1)}{2} & 1 + i \frac{\varepsilon\omega(n^2-1)}{2} \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} i\varepsilon^3\omega^3 \frac{(n^2-1)^2}{12} & i\varepsilon^3\omega^3 \frac{(n^2-1)n^2}{12} \\ -i\varepsilon^3\omega^3 \frac{(n^2-1)n^2}{12} & -i\varepsilon^3\omega^3 \frac{(n^2-1)^2}{12} \end{pmatrix} + \dots \quad . \quad (5.15)$$


---

In nullter Ordnung erhält man für die Transfermatrix der Schwelle die Identität, höhere Ordnungen werden zunehmend durch Potenzen von  $\varepsilon\omega n^2$  bestimmt. Durch einen Vergleich der Transfermatrix  $\hat{\mathbf{T}}_{\square}$  bis zur ersten Ordnung in  $\varepsilon$  mit der Transfermatrix  $\hat{\mathbf{T}}_{\delta}$  des  $\delta$ -Streuers aus (5.4),

$$\hat{\mathbf{T}}_{\square}(\varepsilon^0) + \hat{\mathbf{T}}_{\square}(\varepsilon^1) \approx \hat{\mathbf{T}}_{\delta} \quad , \quad (5.16)$$

läßt sich die Polarisierbarkeit des Punktstreuers in Abhängigkeit von der Ausdehnung der Schwelle wie folgt einführen:

$$\alpha(\omega) = \varepsilon \{ [n(\omega)]^2 - 1 \} \quad . \quad (5.17)$$

Mit

$$\varepsilon^3\omega^3(n^2-1)n^2 = (\varepsilon\omega)(\alpha\omega)(\alpha\omega + \varepsilon\omega)$$

bleibt (5.16) gültig, solange

$$(\varepsilon\omega)(\alpha\omega) \ll 1 \quad (5.18)$$

erfüllt wird und höhere Ordnungen in (5.15) vernachlässigbar werden. Mit (5.18) wird klar: Ein  $\delta$ -Streuer mit schwacher Polarisierbarkeit oder  $\alpha\omega \ll 1$  läßt sich durch eine beliebige Potentialschwelle *verschmieren* bzw. eine Potentialschwelle im langwelligen Grenzfall mit  $\varepsilon\omega \ll 1$  ist durch einen  $\delta$ -Streuer beliebiger Polarisierbarkeit ersetzbar. In erster Ordnung ist also jede Potentialschwelle ein Punktstreuer und umgekehrt, jeder Punktstreuer eine verschmierte Potentialschwelle. Das Verschmieren ist dabei in der Tat wörtlich zu nehmen. Mit

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \int_{-\varepsilon/2}^{\varepsilon/2} dx \frac{1}{\varepsilon} = 1$$

erhält man für den Grenzfall

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} [n(\omega, \varepsilon)]^2 = 1 + \alpha(\omega)\delta(0)$$

erneut die nach (5.1) vorausgesetzte Dielektrizitätsfunktion eines einzigen Punktstreuers.

Im Folgenden soll immer davon ausgegangen werden, daß die Wellenlänge der Felder im Vergleich zur Ausdehnung der Schwelle um ein Vielfaches größer ist. Schließlich möchte man ja Gitter realisieren in denen der Betrag der Periode selbst in der Nähe der Wellenlänge liegt. Für einen zur Schwelle äquivalenten Punktstreuer hat man in diesem Fall daher eine gewisse Freiheit den Wert der Polarisierbarkeit zu wählen.

Da die Rauschstromdichte bei der Konstruktion der Transfermatrix eines Punktstreuers als stetig vorausgesetzt worden ist und mit (2.36) diese Forderung auch auf die Dielektrizität übertragen wird, ist der Punktstreuer von vornherein immer symbolisch als eine infinitesimale Potentialschwelle zu verstehen. Aufgrund dieser Tatsache kann die Rauschstromdichte eines *einzelnen* Punktstreuers im freien Raum ( $\hbar=\epsilon_0=0$ ),

$$\hat{\mathbf{j}}_N(x, \omega) = \omega \sqrt{\frac{1}{\pi} \Im \{ [n(\omega, \epsilon)]^2 \}} \hat{\mathbf{f}}(x, \omega) ,$$

nun auf eine integrierbare Funktion zurückgeführt werden, wenn an geeigneter Stelle auch die Rauschpolarisation mit Hilfe von (5.17) verschmiert wird und die Bedingung (5.18) beachtet wird,

$$\int_{ma-\epsilon}^{ma+\epsilon} dx j_N(x, \omega) = \sqrt{\frac{\omega^2 \Im [\alpha(\omega)]}{\pi \epsilon}} \int_{ma-\epsilon}^{ma+\epsilon} \hat{\mathbf{f}}(x, \omega) .$$

Dabei sind die durch  $\hat{\mathbf{f}}(x, \omega)$  beschriebenen Felder als stetig vorausgesetzt worden. Davon soll im Folgenden Gebrauch gemacht werden.

## 6. QED IM PERIODISCHEN PUNKSTREUERMODELL

### 6.1. Das quantisierte Strahlungsfeld

An dieser Stelle kann man sich nun dem Problem der Ausbreitung quantisierter Strahlung im Gitter zuwenden und die in 2 vorgestellten Quantisierungsschemata speziell auf das in 5 beschriebene Modell übertragen. Das Modell besteht weiterhin aus einer periodischen Anordnung von Punktstreuern mit den in 5 bereits beschriebenen Eigenschaften. Als Näherung soll das System ins Unendliche ausgedehnt werden, die Translationssymmetrie bleibt somit erhalten. Mit der Beschränkung auf skalare Felder setzt man linear polarisierte Strahlung voraus, die sich hier im speziellen Fall in  $x$ -Richtung ausbreiten soll. Die Antwort des inhomogenen Mediums wird dabei durch die Dielektrizitätsfunktion (5.1) gegeben, die aus Kausalitätsgründen den KRAMERS-KRONIG-Relationen (2.15) und (2.16) genügen muß.

Diese Relationen sind fundamental, verschwindende Absorption mit  $\Im[\epsilon(x, \omega)] = 0$  bei einer Dispersion mit  $\Re[\epsilon(x, \omega)] \neq 1$  verletzen die KRAMERS-KRONIG-Relationen. Die homogenen Lösungen der inhomogenen Wellengleichung (2.32) in 2.3, die formal als Blochmoden bezeichnet werden, wurden bereits in 3.1 und 4.3 als Eigenvektoren des Translationsoperators identifiziert und sind entsprechend normierbar ( $|\lambda_+| = 1$ ). Wenn sie existieren, muß dies im Einklang mit den KRAMERS-KRONIG-Relationen geschehen. Bereits zuvor wurde in 2.2 festgestellt, daß die Quantisierung mittels Modenzersetzung, mit Ausnahme des freien Feldes im Vakuum, nur eine Näherung für Schmalbandfelder sein kann. Das Quantisierungsschema muß also auch den Fall der Blochmoden mit  $\Im[\epsilon(x)] \rightarrow 0$  beinhalten.

#### 6.1.1. Die klassische Modenentwicklung

Die homogene Wellengleichung (2.21) aus 2.2 wird üblicherweise durch einen Separationsansatz gelöst und das Vektorpotential in Form einer Modenentwicklung dargestellt,

$$\hat{\mathbf{A}}(x, t) = \sum_{k, m} c_{km} A_{km}(x) \hat{\mathbf{q}}_{km}(t), \quad (6.1)$$

wobei die Modenfunktionen Lösungen der Wellengleichung mit räumlich veränderlicher Phasengeschwindigkeit sind,

$$[\partial_x^2 + \epsilon(x)\omega_{km}^2] A_{km}(x) = 0 \quad (6.2)$$

und die  $\hat{\mathbf{q}}_{km}$ , als Operatoren im HEISENBERG-Bild, Bewegungsgleichungen für harmonische Oszillatoren genügen,

$$\partial_t^2 \hat{\mathbf{q}}_{km}(t) = -\omega_{km}^2 \hat{\mathbf{q}}_{km}(t).$$

Dabei wurde zur Vereinfachung, wie bereits an einigen Stellen vorher schon,  $c=1$  benutzt. Dies soll ab jetzt zusammen mit  $\mu_0 = \hbar = 1$ , soweit nicht anders erforderlich, immer so gelten. Da man im Fall periodischer Strukturen mit der Periode  $a$  und  $\epsilon(x+a) = \epsilon(x)$  um die Existenz der photonischen Bandstruktur weiß, wird neben der Mode zum Pseudoimpuls  $k$  auch gleichzeitig zwischen den diskreten Bändern  $m$  unterschieden.

Die Modenentwicklung bezieht sich zunächst auf das HEISENBERG-Bild. Es ist klar, daß sie auch im SCHRÖDINGER-Bild gilt. Mit den Feldoperatoren sind natürlich auch die Modenoperatoren im SCHRÖDINGER-Bild als zeitunabhängig anzusehen und die Zustände tragen die volle Zeitabhängigkeit. Solange nicht ein bestimmtes Bild bevorzugt wird, kann man daher das Zeitargument weglassen. Das elektrische Feld soll in Anlehnung an das freie Strahlungsfeld durch

$$\hat{\mathbf{E}}(x, t) = - \sum_{k, m} c_{km} A_{km}(x) \partial_t \hat{\mathbf{q}}_{km}(t) \quad (6.3)$$

gegeben sein. Im Fall des freien Feldes im Vakuum mit  $\epsilon(x) = 1$  bilden die Modenfunktionen ein Orthonormalsystem und zwar speziell im Raum der transversalen Vektorfunktionen, was im Fall linear polarisierter Strahlung nicht weiter ins Gewicht fällt. Diese Tatsache kann dazu benutzt werden, um mit Hilfe einer kanonischen Transformation durch Übergang der alten Feldoperatoren  $\hat{\mathbf{A}}(x, t)$ ,  $\hat{\mathbf{E}}(x, t)$  zu neuen Operatoren  $\hat{\mathbf{q}}$  und  $\partial_t \hat{\mathbf{q}}$  das Strahlungsfeld in einem zunächst endlichen Volumen als ein System unendlich vieler harmonischer Oszillatoren aufzufassen, wobei jede diskrete Mode einem Oszillator entspricht.

Im Fall des Strahlungsfeldes in einem endlichen Volumen werden die Quanten der den diskreten *monochromatischen* Moden entsprechenden harmonischen Oszillatoren auch Photonen genannt. Neben den Operatoren  $\hat{\mathbf{q}}$  und  $\partial_t \hat{\mathbf{q}}$  ist es deshalb zweckmäßig, Operatoren einzuführen, die direkt der Erzeugung und Vernichtung dieser Quanten sowie ihrer Anzahl zugeordnet werden können:

$$\hat{\mathbf{q}}_k = \sqrt{\frac{1}{2\omega_k}} (\hat{\mathbf{a}}_k + \hat{\mathbf{a}}_k^\dagger), \quad (6.4)$$

$$\partial_t \hat{\mathbf{q}}_k = -i \sqrt{\frac{\omega_k}{2}} (\hat{\mathbf{a}}_k - \hat{\mathbf{a}}_k^\dagger). \quad (6.5)$$

Da es sich um eine *kanonische* Transformation handelt,

$$[\hat{\mathbf{q}}_k, \partial_t \hat{\mathbf{q}}_{k'}] = i \delta_{kk'},$$

$$[\hat{\mathbf{q}}_k, \hat{\mathbf{q}}_{k'}] = [\partial_t \hat{\mathbf{q}}_k, \partial_t \hat{\mathbf{q}}_{k'}] = 0,$$

kann man sich leicht vom bosonischen Charakter der Photonen überzeugen,

$$[\hat{\mathbf{a}}_k, \hat{\mathbf{a}}_{k'}^\dagger] = \delta_{kk'},$$

$$[\hat{\mathbf{a}}_k^\dagger, \hat{\mathbf{a}}_{k'}^\dagger] = [\hat{\mathbf{a}}_k, \hat{\mathbf{a}}_{k'}] = 0.$$



Im Fall  $\epsilon(x) \neq 1$  ist der Operator  $\hat{\Theta}_E$  der homogenen Wellengleichung (2.21) nicht mehr hermitesch. Die Modenfunktionen, die die Gleichung erfüllen, bilden so kein Orthonormalsystem mehr. Eine kanonische Transformation von  $\hat{\mathbf{A}}(x, t)$ ,  $\hat{\mathbf{E}}(x, t)$  nach  $\hat{\mathbf{q}}_{km}$  und  $\partial_t \hat{\mathbf{q}}_{km}$  ist so ohne weiteres nicht mehr möglich<sup>10</sup>,

$$[\hat{\mathbf{q}}_{km}, \partial_t \hat{\mathbf{q}}_{k'm'}] \neq i\delta_{mm'} \delta_{kk'} .$$

Nach 2.2 bzw. [Sak02] kann man aber zu Felder

$$A_Q(x, t) = \sqrt{\epsilon(x)} A(x, t)$$

übergehen, deren Modenfunktionen  $\sqrt{\epsilon(x)} A_{km}(x)$  wiederum Eigenfunktionen eines hermiteschen Operators  $\hat{\Theta}_Q$  mit (2.25) sind und damit ihrerseits wieder ein Orthonormalsystem bilden können,

$$c_{km} c_{k'm'}^* \int_L dx \epsilon(x) A_{km}(x) A_{k'm'}^*(x) = \delta_{kk'} \delta_{mm'} , \quad (6.6)$$

$$\sum_k |c_{km}|^2 \sqrt{\epsilon(x)\epsilon(x')} A_{km}(x) A_{km}^*(x') = \delta(x-x') .$$

Die Modenfunktionen  $A_{km}(x)$  bleiben also mit  $\epsilon(x) \in \mathbb{R}$  im verallgemeinerten Sinn orthonormal.

Es ist ohnehin nicht notwendig in diesem Fall immer eine kanonische Transformation der alten Felder zu fordern, denn die Darstellung der Feldoperatoren mittels Modenentwicklung erhält man direkt aus den Modenentwicklungen der klassischen Felder, wenn man die dortigen Modenfunktionen übernimmt und die komplexen Entwicklungskoeffizienten bis auf entsprechende Faktoren durch Photonenvernichtungs- und Erzeugungsoperatoren ersetzt. Die Bestimmung der Modenstruktur des Strahlungsfeldes bleibt damit ein rein klassisches, allgemein nicht triviales Problem. Die Quantennatur der Strahlung wird durch die Photonenvernichtungs- und Erzeugungsoperatoren repräsentiert. Schließlich können die Modenentwicklungen der Felder durch Einführen der Erzeuger und Vernichter aus (6.4) und (6.5) wie folgt dargestellt werden:

$$\hat{\mathbf{A}}(x) = \sum_{k,m} \sqrt{\frac{1}{2\omega_{km}}} c_{km} A_{km}(x) \hat{\mathbf{a}}_{km} + \text{h. c.} ,$$

$$\hat{\mathbf{E}}(x) = i \sum_{k,m} \sqrt{\frac{\omega_{km}}{2}} c_{km} A_{km}(x) \hat{\mathbf{a}}_{km} + \text{h. c.} .$$

<sup>10</sup> Interessanterweise funktioniert das Quantisierungsschema wieder erneut wie beim freien Feld, wenn man die Felder  $A_Q(x, t)$  und  $E_Q(x, t)$  in Feldoperatoren überführt, so daß

$$[\hat{\mathbf{A}}_Q(x, t), \hat{\mathbf{E}}_Q(x', t)] = -i\delta(x-x') .$$

Damit ist allerdings eine andere Wahl für die kanonisch konjugierten Operatoren getroffen worden als oben.

Nach [Sak02] ist es sinnvoll im Fall  $\epsilon(x) \neq 1$  die Energie  $H$  des Strahlungsfeldes ( $\epsilon_0 = \mu_0 = 1$ ),

$$H = \frac{1}{2} \int_L dx \epsilon(x) |E(x, t)|^2 + |\partial_x A(x, t)|^2 , \quad (6.7)$$

auf den HAMILTON-Operator von  $m$  harmonischen Oszillatoren zu reduzieren. Mit der verallgemeinerten Orthonormalität der Modenfunktionen folgt<sup>11</sup> :

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} \int_L dx \epsilon(x) \hat{\mathbf{E}} \hat{\mathbf{E}}^\dagger &= \frac{1}{2} \sum_{k,m} \omega_{km} \left( 2\hat{\mathbf{a}}_{km}^\dagger \hat{\mathbf{a}}_{km} + 1 \right) \\ &\quad - \frac{1}{2} \int_L dx \partial_x \hat{\mathbf{A}} \partial_x \hat{\mathbf{A}}^\dagger , \end{aligned}$$

oder

$$\hat{\mathbf{H}} = \sum_{km} \omega_{km} \left( \hat{\mathbf{a}}_{km}^\dagger \hat{\mathbf{a}}_{km} + \frac{1}{2} \right) .$$

Es werden also im Band mit der Bandnummer  $m$  entsprechend  $n_k = \langle \hat{\mathbf{a}}_k^\dagger \hat{\mathbf{a}}_k \rangle$  Schwingungsquanten in der Mode  $k$  angeregt. Wird über die  $c_{km}$  so verfügt, daß  $c_{km} = 1$  gilt, dann sind die Modenfunktionen  $A_{km}(x)$  auf eins normiert. Im Fall einer periodischen, absorptionsfreien Anordnung mit  $\epsilon(x) = \epsilon(x+a)$  sind die Modenfunktionen mit den Blochmoden identisch und durch die Eigenvektoren der Transfermatrizen gegeben. Es ist daher nützlich die Modenfunktionen in dieser Art von Resonatoranordnung auf das endliche Quantisierungsvolumen bzw. die Länge  $L$  des Kristalls oder Systems zu normieren,

$$\hat{\mathbf{E}}(x) = i \sum_{k,m} \sqrt{\frac{\omega_{km}}{2L}} A_{km}(x) \hat{\mathbf{a}}_{km} + \text{h. c.} , \quad (6.8)$$

$$\int_L dx \epsilon(x) A_{km}(x) A_{k'm'}^*(x) = L \delta_{kk'} \delta_{mm'} . \quad (6.9)$$

Der Übergang zum unendlich ausgedehnten System und dem entsprechenden Modenkontinuum kann dann wieder gemäß dem *Kontinuumslimes* durch  $L \rightarrow \infty$  realisiert werden. Anstelle des KRONECKER-Symbols für die die Moden charakterisierenden kontinuierlichen Parameter tritt die  $\delta$ -Funktion.

<sup>11</sup> Aufgrund der periodischen Randbedingung beachte man beim Ausmultiplizieren, daß nach partieller Integration mit  $\lim_{|x| \rightarrow \infty} A_{km}(x) = 0$  folgt:

$$\begin{aligned} \int_L dx \partial_x A_{km}(x) \partial_x A_{k'm'}^*(x) &= - \int_L dx A_{km}(x) \partial_x^2 A_{k'm'}^*(x) \\ &= \int_L dx \epsilon(x) \omega_{k'm'}^2 A_{km}(x) A_{k'm'}^*(x) \\ &= (c_{km} c_{k'm'})^{-1} \omega_{k'm'}^2 \delta_{kk'} \delta_{mm'} , \end{aligned}$$

wobei in den beiden letzten Schritten von (6.2) und (6.6) Gebrauch gemacht worden ist.

Dem aufmerksamen Beobachter wird nicht entgangen sein, daß die Normierung auf eine Länge nicht ausreicht, um das vollständige Quantisierungsvolumen zu erfassen. Zusätzlich muß man auch die Querschnittsfläche  $A$  der dazu senkrecht polarisierten Strahlung mit berücksichtigen. *Lebt* der Beobachter der linear polarisierten Strahlung jedoch in einer eindimensionalen Welt, nimmt er die ansonsten planaren Streuer immer als Punktobjekte wahr. Diese Einschränkung ändert jedoch allgemein nichts an den Ergebnissen, die sich daraus für die linear polarisierte Strahlung im ansonsten dreidimensionalen Raum ergeben. In diesem Fall ist es lediglich notwendig die Felder mit einem zusätzlichen Faktor  $1/\sqrt{A}$  auf die dann erforderliche Querschnittsfläche zu beziehen.

Die Modenzerlegung des Strahlungsfeldes mit (6.8) erfolgt unabhängig von dem hier betrachteten Modell und scheint zunächst von geringerer Bedeutung. An späterer Stelle wird allerdings noch genauer auf die Modenzerlegung im Punktstreuermodell eingegangen werden, so daß von den hier vorgebrachten Punkten noch Gebrauch gemacht wird.

### 6.1.2. Quantisierung mit Hilfe der phänomenologischen MAXWELL-Gleichungen

Das quantisierte Strahlungsfeld, das die Kausalität nicht verletzt und zudem aus den richtigen Materialgleichungen hervorgeht, ist in 2.3 mit (2.41) gegeben. Im Gegensatz zur Modenzerlegung wird hier das Problem wieder klassisch auf die Bestimmung der GREENS-Funktion reduziert. Sie beinhaltet sämtliche Informationen über das Gitter und mit der Polarisierbarkeit  $\alpha(\omega)$  auch die Forderung der KRAMERS-KRONIG-Relationen. Das Konzept der GREENS-Funktion ist allgemein bekannt. Sie ist mit

$$[\partial_x^2 + \omega^2 \epsilon(x, \omega)] G(x', x, \omega) = -\delta(x - x') \quad (6.10)$$

eine *Fundamentallösung* des Differentialoperators aus (2.32). Physikalisch wird die GREENS-Funktion bestimmt, indem man eine Probeladung bzw. eine Quelle an den Ort  $x'$  in das Gebiet hineinbringt und das Feld am Ort  $x$  des Beobachters bestimmt. Als grundlegende

Eigenschaft ist sie mit

$$G(x', x, \omega) = G(x, x', \omega) , \quad (6.11)$$

eine symmetrische Funktion in  $x$  und  $x'$ . Weil die Dielektrizitätsfunktion nach 2.1 mit

$$\epsilon^*(x, \omega) = \epsilon(x, -\omega)$$

eine holomorphe Funktion in der oberen Halbebene ist, besitzt die Differentialgleichung (6.10) zwei linear unabhängige Lösungen  $G(x, x', \omega)$  und  $G^*(x, x', \omega)$  mit

$$G^*(x, x', \omega) = G(x, x', -\omega) . \quad (6.12)$$

In 2.5 wurden diese beiden Lösungen durch die Strahlungsbedingung (2.46) bereits voneinander unterschieden. Die Beziehungen (6.11) und (6.12) lassen sich insbesondere an der auslaufenden GREENS-Funktion (2.53) für homogene Medien nachprüfen.

Neben der Bestimmung der GREENS-Funktion taucht in (2.41) für den Fall einer Anordnung von Punktstreuern das Problem auf, die Verknüpfung des Imaginärteils der Dielektrizitätsfunktion mit der Wurzelfunktion so zu formulieren, daß die Rauschstromdichte  $\hat{\mathbf{j}}_N$  integrierbar wird,

$$\hat{\mathbf{j}}_N(\vec{r}, \omega) = \omega \sqrt{\frac{1}{\pi} \Im[\epsilon(\vec{r}, \omega)]} \hat{\mathbf{f}}(\vec{r}, \omega) .$$

Bereits in 5 wurde schon festgestellt, daß ein Punktstreuer nur symbolisch zu verstehen ist und die Rauschstromdichte durch verschmieren des Punktstreuers integrierbar gemacht werden kann. Dies läßt sich ohne weiteres auf die periodische Anordnung der Punktstreuer übertragen,

$$\Im[\epsilon(x', \omega)] \stackrel{\epsilon \rightarrow 0}{=} \frac{\Im[\alpha(\omega)]}{\epsilon} \sum_m \Theta\left(\frac{\epsilon}{2} - |x' - ma|\right) ,$$

wobei  $\Theta(x)=1$  für  $x > 0$ . Aufgrund von punktwiser Konvergenz verhält sich die Wurzel in diesem speziellen Fall wie eine Linearform (siehe C), so daß sich letztendlich aus (2.41) für die elektrische Feldstärke im SCHRÖDINGER-Bild ergibt ( $\hbar=\mu_0=1$ ):

$$\hat{\mathbf{E}}(x) = i \int_0^\infty d\omega \omega^2 \sqrt{\frac{\Im[\alpha(\omega)]}{\pi}} \sum_m \left[ \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{1}{\sqrt{\epsilon}} \int_{\mathbb{R}} dx' G(x, x', \omega) \Theta\left(\frac{\epsilon}{2} - |x' - ma|\right) \hat{\mathbf{f}}(x', \omega) \right] + \text{h. c.} . \quad (6.13)$$

Da in diesem speziellen Modell nur auf jeden einzelnen Streuer bei  $x'=ma$  eine Quelle gesetzt werden muß, kann man die GREENS-Funktion um den Punkt  $x'=ma$  entwickeln und sich auf die so gewonnene *effektive* GREENS-

Funktion beschränken,

$$G(x, x', \omega) \Theta_{\epsilon/2} \longrightarrow G_{\text{eff}}(x, ma, \omega) \Theta_{\epsilon/2} .$$

Die Quelle wird dabei also bei einem bestimmten Streuer festgehalten und man variiert nur noch den Beobachter relativ zur Quelle im Medium. Um das resultierende Feld zu erhalten, muß man über alle Quellen in der Struktur integrieren. Sei  $f(x', \omega)$  in der Weise beschränkt, daß das verbleibende Integral in (6.13) konvergiert, dann kann in Übereinstimmung mit C ein neuer Operator in der Weise definiert werden, daß

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \int_{ma-\varepsilon/2}^{ma+\varepsilon/2} dx' \frac{\hat{\mathbf{f}}(x', \omega)}{\sqrt{\varepsilon}} = \hat{\mathbf{f}}_m(\omega) .$$

Damit kann das Problem vollständig auf die diskrete Anordnung der Streuer reduziert werden. Da es sich bei den Polaritonen um Bosonen handelt, muß dieser Charakter auch durch die neuen Erzeuger und Vernichter  $\hat{\mathbf{f}}_m(\omega)$  und  $\hat{\mathbf{f}}_m^\dagger(\omega)$  zum Ausdruck kommen. Für die Vertauschungsrelationen ergibt sich:

$$\left[ \hat{\mathbf{f}}_m(\omega), \hat{\mathbf{f}}_{m'}(\omega') \right] = 0 \quad (6.14)$$

$$\begin{aligned} \left[ \hat{\mathbf{f}}_m(\omega), \hat{\mathbf{f}}_{m'}^\dagger(\omega') \right] &\stackrel{\varepsilon \rightarrow 0}{=} \frac{1}{\varepsilon} \int_{ma-\varepsilon/2}^{ma+\varepsilon/2} dx \int_{m'a-\varepsilon/2}^{m'a+\varepsilon/2} dx' \\ &\quad \times \left[ \hat{\mathbf{f}}(x, \omega), \hat{\mathbf{f}}^\dagger(x', \omega') \right] \\ &\stackrel{\varepsilon \rightarrow 0}{=} \frac{1}{\varepsilon} \int_{ma-\varepsilon/2}^{ma+\varepsilon/2} dx \int_{m'a-\varepsilon/2}^{m'a+\varepsilon/2} dx' \\ &\quad \times \delta(\omega - \omega') \delta(x - x') . \end{aligned}$$

Mit den Vertauschungsrelationen (2.38)-(2.40) wird (6.14) offensichtlich. Wendet man für die verbleibende Vertauschungsrelation den Satz von FUBINI an, so ergibt sich:

$$\begin{aligned} \left[ \hat{\mathbf{f}}_m(\omega), \hat{\mathbf{f}}_{m'}^\dagger(\omega') \right] &= \delta(\omega - \omega') \\ &\quad \times \begin{cases} = 1 & : x' \in [m'a + \varepsilon/2, m'a - \varepsilon/2] \\ & \quad \vee x \in [ma + \varepsilon/2, ma - \varepsilon/2] \\ = 0 & : \text{sonst} \end{cases} . \end{aligned}$$

Im Limes  $\varepsilon \rightarrow 0$  behalten damit die Erzeuger und Vernichter  $\hat{\mathbf{f}}_m(\omega)$ ,  $\hat{\mathbf{f}}_m^\dagger(\omega)$  die Vertauschungsrelationen für Bosonen bei,

$$\left[ \hat{\mathbf{f}}_m(\omega), \hat{\mathbf{f}}_{m'}^\dagger(\omega') \right] = \delta(\omega - \omega') \delta_{mm'} . \quad (6.15)$$

Mit den obigen Vereinfachungen und

$$\hat{\mathbf{A}}(x, \omega) = (i\omega)^{-1} \hat{\mathcal{E}}(x, \omega)$$

folgt damit im Modell  $\infty$ -periodisch angeordneter Punktstreuer für das quantisierte Strahlungsfeld (6.13) und das

dazu geeignete Vektorpotential:

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{E}}(x) &= i \int_0^\infty d\omega \omega^2 \sqrt{\frac{\Im(\alpha)}{\pi}} \sum_m G_{\text{eff}}(x, ma, \omega) \hat{\mathbf{f}}_m(\omega) \\ &\quad + \text{h. c.} , \quad (6.16) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{A}}(x) &= \int_0^\infty d\omega \omega \sqrt{\frac{\Im(\alpha)}{\pi}} \sum_m G_{\text{eff}}(x, ma, \omega) \hat{\mathbf{f}}_m(\omega) \\ &\quad + \text{h. c.} . \quad (6.17) \end{aligned}$$

Dabei ist die effektive GREENS-Funktion das Feld, das eine Quelle auf einem Streuer bei  $x'=ma$  erzeugt. Im Rahmen der kanonischen Feldquantisierung müssen die einzelnen Operatoren  $\hat{\mathbf{E}}$ ,  $\hat{\mathbf{B}}$  und  $\hat{\mathbf{A}}$  die allgemeinen Vertauschungsrelationen untereinander erfüllen [CTDRG89]. Mit (6.16), (6.15) und (6.14) ergibt sich für den Kommutator des elektrischen Feldes:

$$\begin{aligned} \left[ \hat{\mathbf{E}}(x), \hat{\mathbf{E}}(x') \right] &= -i \frac{2}{\pi} \int_0^\infty d\omega \omega^4 \Im[\alpha(\omega)] \\ &\quad \times \sum_m \Im [G_{\text{eff}}(x', ma, \omega) G_{\text{eff}}^*(x, ma, \omega)] \\ &\stackrel{\text{(C4)}}{=} 0 \\ &= \left[ \hat{\mathbf{A}}(x), \hat{\mathbf{A}}(x') \right] , \quad (6.18) \end{aligned}$$

sowie aus (6.17) für den Kommutator zwischen Potential  $\hat{\mathbf{A}}$  und dazu kanonisch konjugiertem Feld  $\hat{\mathbf{E}}$ :

$$\begin{aligned} \left[ \hat{\mathbf{A}}(x), \hat{\mathbf{E}}(x') \right] &= -i \frac{2}{\pi} \int_0^\infty d\omega \omega^3 \Im[\alpha(\omega)] \\ &\quad \times \sum_m \Re [G_{\text{eff}}(x', ma, \omega) G_{\text{eff}}^*(x, ma, \omega)] \\ &\stackrel{\text{(C3)}}{=} -\frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^\infty d\omega \omega G(x', x, \omega) \\ &\stackrel{!}{=} -i \delta(x - x') . \quad (6.19) \end{aligned}$$

Der Schritt von der jeweils ersten Zeile auf die nächste Zeile durch (C4) und (C3) wird in C gezeigt. In der zweiten Zeile von (6.19) haben dabei zusätzlich die Relationen (6.11) und (6.12) ihre Anwendung gefunden. Die Auswertung des Ausdrucks in (6.19) erfordert die Kenntnis der GREENS-Funktion und zwar unabhängig vom betrachteten Modell die Kenntnis der vollständigen GREENS-Funktion. Für das freie Strahlungsfeld im Vakuum ( $n=1$ ) erhält man mit  $G^+(x, x', \omega)$  aus (2.53):

$$\begin{aligned} \left[ \hat{\mathbf{A}}(x), \hat{\mathbf{E}}(x') \right] &= -i \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^\infty d\omega \exp[i\omega |x - x'|] \\ &= -i \delta(x - x') , \end{aligned}$$

dabei hat man zu berücksichtigen, daß die  $\delta$ -Funktion eine gerade Funktion ist.

Mit (6.19) beinhaltet die GREENS-Funktion nicht nur die Informationen zur Geometrie und Kausalität, sie muß

zudem auch noch mit  $x \rightarrow x'$  eine gewisse Unschärfe enthalten. Allgemein ist es nicht möglich die Beziehung (6.19) mit einer beliebigen, meist unhandlichen GREENS-Funktion zu zeigen. Im Fall homogener Medien mit  $n \neq 1$  kann man sich noch die FOURIER-Transformierte (2.48) der GREENS-Funktion zu nutze machen und zusammen mit (2.20) das Integral in der komplexen Ebene auswerten [GW96a]. Die allgemeine Betrachtung inhomogener Medien erfordert höhere Eigenschaften des GREEN-Tensors, um (6.19) exakt zu beweisen [KW98].

Um auch noch die Vertauschungsrelation mit dem Magnetfeld zu bestimmen, bedenke man wieder, daß es sich hier um linear polarisierte Strahlung handelt,

$$\vec{B}(\vec{r}, t) \rightarrow B_z(x) = \partial_x A_y(x) .$$

Wenn die GREENS-Funktion die Beziehung (6.19) erfüllt, wird auch die Letzte der durch die kanonische Feldquantisierung geforderten Vertauschungsrelationen bestätigt,

$$\begin{aligned} [\hat{E}_y(x), \hat{B}_z(x')] &= [\hat{E}_y(x), \partial_{x'} \hat{A}_y(x')] \\ &= \partial_{x'} [\hat{E}_y(x), \hat{A}_y(x')] \\ &= i \partial_{x'} \delta(x - x') . \end{aligned}$$

## 6.2. Bestimmung der GREENS-Funktion

Die Observablen (6.16) und (6.17) werden durch die GREENS-Funktion vervollständigt. Da die Quelle direkt auf einem Punktstreuer sitzt und jeder Punktstreuer in erster Ordnung eine Potentialschwelle ist, ist es in diesem speziellen Modell günstig, zunächst eine Quelle in eine schmale Potentialschwelle mit der Ausdehnung  $\varepsilon$  und Stärke  $n(\omega, \varepsilon)$  zu setzen, deren linker und rechter Halbraum im Abstand  $a - \varepsilon/2$  vom Ursprung der Schwelle von einem unendlich ausgedehnten, periodischen System von Punktstreuern mit der Periode  $a$  vervollständigt wird, das Feld dieser Quelle bestimmt und dieses dann im Limes  $\varepsilon \rightarrow 0$  entwickelt. Was in nullter Ordnung übrig bleibt, kann dann erwartungsgemäß als GREENS-Funktion einer Quelle auf einem Punktstreuer aufgefaßt werden.

Die GREENS-Funktion der Schwelle, die die Gleichung (6.10) erfüllt und im Unendlichen verschwinden muß, kann je nach relativer Position von Beobachter und Quelle zueinander in drei Teile zerlegt werden,

$$G(x, x', \omega) = G_0(x, x', \omega) + G_{\square}(x, x', \omega) + G_{\square'}(x, x', \omega) . \quad (6.20)$$

$G_0(x, x', \omega)$  ist dabei die GREENS-Funktion, die nach 2.5 als Lösung von (6.10) durch (2.53) gegeben wird. Beobachter und Quelle befinden sich beide in der Schwelle.  $G_0(x, x', \omega)$  ist dabei nur die effektiv in der Schwelle abgestrahlte Lösung. Der Beobachter in der Schwelle nimmt aber auch noch zusätzlich Reflexionen wahr, die es im Folgenden zu berücksichtigen gilt. Das Gebiet muß innerhalb der Schwelle begrenzt werden. Dazu ist es

zweckmäßig eine charakteristische Funktion  $\Theta_{\varepsilon/2}^0(x, m)$  zu definieren, die eben diese Bedingung logisch einführt [GW96b],

$$\Theta_{\varepsilon/2}^0(x, m) = \begin{cases} 1 & : \left( ma - \frac{\varepsilon}{2} \right) < x < \left( ma + \frac{\varepsilon}{2} \right) \\ 0 & : \text{sonst} \end{cases} .$$

Versmirt man den Punktstreuer zu einer Potentialschwelle an der Stelle  $x' = ma$ , so erhält man mit (2.53) für  $G_0(x, x', \omega)$ :

$$G_0(x, x', \omega) = \sum_m \Theta_{\varepsilon/2}^0(x, m) \Theta_{\varepsilon/2}^0(x', m) \quad (6.21) \\ \times [-2i\omega n(\omega)]^{-1} \exp[i\omega n(\omega) |x - x'|] .$$

Weiterhin kann mit  $G_{\square'}(x, x', \omega)$  der Teil der Lösung angegeben werden, bei dem sich Quelle und Beobachter außerhalb der Potentialschwelle befinden. Da man aber nur an der effektiven GREENS-Funktion interessiert ist, bei der die Quelle auf dem Streuer sitzt, ist es klar, daß diese Lösung im Weiteren nicht mehr mit berücksichtigt werden braucht.

Mit  $G_{\square}(x, x', \omega)$  wird der Teil der Lösung beschrieben, welcher der homogenen Lösung von (6.10) entspricht,

$$[\partial_x^2 + \omega^2 \epsilon(x, \omega)] G_{\square}(x, x', \omega) = 0 .$$

Diese umfaßt zum einen das Feld, das die Quelle innerhalb der Schwelle abstrahlt und der Beobachter außerhalb der Schwelle mißt und zum anderen die Reflexionen, die der Beobachter wahrnehmen kann, wenn er sich mit der Quelle in der Schwelle befindet. Die Lösung der homogenen Wellengleichung kann man ohne Probleme durch ebene Wellen bestimmen. Unterteilt man von der Schwelle aus die Lösungen mit  $j \in \{-1, 0, 1\}$  speziell in den linken Halbraum, dem Gebiet der Schwelle und den rechten Halbraum, wenn sich die Schwelle bei  $x' = ma$  befindet, so ergibt sich für den Lösungsansatz für  $G_{\square}(x, x', \omega)$ :

$$G_{\square}(x, x', \omega) = \sum_{m, l} \sum_{j=-1}^{j=1} \{ \xi_j(x', l) \exp[i\omega n_j(\omega)(x - ma)] \\ + \zeta_j(x', l) \exp[-i\omega n_j(\omega)(x - ma)] \} \\ \times \Theta_{\varepsilon/2}^j(x, m + jl) \Theta_{\varepsilon/2}^0(x', m) , \quad (6.22)$$

dabei sind

$$\Theta_{\varepsilon/2}^1(x, m) = \begin{cases} 1 & : \left( ma + \frac{\varepsilon}{2} \right) < x < (m+1)a \\ 0 & : \text{sonst} \end{cases}$$

und

$$\Theta_{\varepsilon/2}^{-1}(x, m) = \begin{cases} 1 & : (m-1)a < x < \left( ma - \frac{\varepsilon}{2} \right) \\ 0 & : \text{sonst} \end{cases}$$

die charakteristischen Funktionen, die das Gebiet des Beobachters links und rechts der Potentialschwelle immer jeweils auf eine Einheitszelle beschränken, welche sich im jeweiligen Halbraum  $j \in \{1, -1\}$  um Vielfache  $l > 0$  der Periode  $a$  von der Schwelle entfernt befindet. Die Lösungen für das Gebiet links und rechts von der Schwelle sind also wieder einlaufende und auslaufende Wellen, deren *frequenzabhängige* Amplituden  $\xi_j(x', l)$  und  $\zeta_j(x', l)$  in der Weise bestimmt werden müssen, daß das entstehende, *verlustbehaftete* Feld stetig an den Grenzen bleibt und dessen Fortsetzung in den linken und rechten Halbraum im Unendlichen verschwindet. Aus diesem Grund beschreiben  $\Theta_{\varepsilon/2}^1$  und  $\Theta_{\varepsilon/2}^{-1}$  immer nur offene Intervalle, da die Felder immer stetig fortgesetzt werden können.

Zwischen den Punktstreuern bzw. zwischen den Punktstreuern und der Schwelle breiten sich die Wellen im Vakuum aus, so daß

$$n_{-1}(\omega) = n_1(\omega) = 1$$

folgt. In der Potentialschwelle breiten sich die Wellen wieder in einem homogenen Medium aus. Bei gegebener Polarisierbarkeit  $\alpha(\omega)$  des verschmierten Punktstreuers kann man daher nach (5.17) einen von der Ausdehnung  $\varepsilon$  der Schwelle abhängigen Brechungsindex

$$n_0(\omega, \varepsilon) = n(\omega) = \sqrt{1 + \frac{\alpha(\omega)}{\varepsilon}} \quad (6.23)$$

einführen. Einen Ausgangspunkt für eine vernünftige Fortsetzung bilden die Amplituden

$$\xi_j = \xi_j(x', 0) \quad , \quad \zeta_j = \zeta_j(x', 0) \quad , \quad j \in \{1, -1\} \quad ,$$

die jeweils direkt auf die beiden Einheitszellen links und rechts von der Schwelle beschränkt bleiben. Die Amplituden  $\xi_0$  und  $\zeta_0$  der Wellen, die sich in der Schwelle ausbreiten, spielen im Limes  $\varepsilon \rightarrow 0$  keine wesentliche Rolle mehr, werden aber zur Bestimmung der Felder links und rechts der Schwelle noch benötigt.  $\xi_0$  und  $\zeta_0$  müssen aus Stetigkeitsgründen in diesem Fall die Werte der Lösungen links und rechts von der Schwelle annehmen.

### 6.2.1. Das Lokalfeld einer Punktquelle

Um die Amplituden  $\xi_j$  und  $\zeta_j$  zu bestimmen, kann man sich der Transporter  $\hat{\mathbf{T}}_{\square}^L$  mit (5.12) und  $\hat{\mathbf{T}}_{\square}^R$  mit (5.13) bedienen, die bereits in 5.3 schon ihre Anwendung gefunden haben. Befindet sich der Beobachter mit  $x > x' + \varepsilon/2$  in der Einheitszelle rechts von der Schwelle bei  $x=ma$ , so erhält man für die Propagation der einlaufenden und auslaufenden Wellen links und rechts der Trennschicht bei  $x=\varepsilon/2$ :

$$\begin{pmatrix} \xi_0 - \frac{\exp[-i\omega n(\omega)(x' - ma)]}{2i\omega n(\omega)} \\ \zeta_0 \end{pmatrix} = \hat{\mathbf{T}}_{\square}^R \begin{pmatrix} \xi_1 \\ \zeta_1 \end{pmatrix} \quad , \quad (6.24)$$

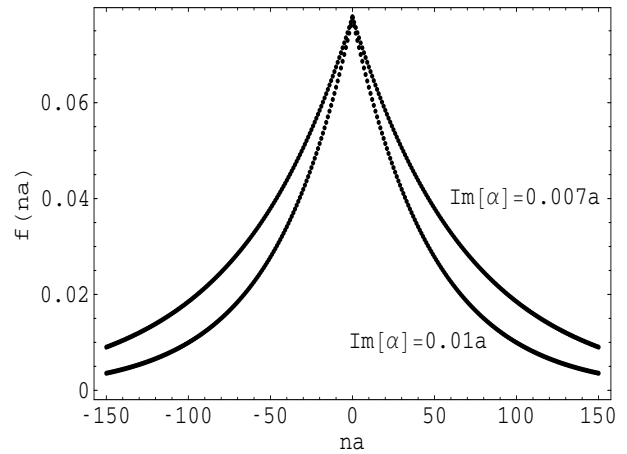


Abbildung 10: Darstellung des Strahlungsfeldes einer Punktquelle bei  $x'=0$  durch  $f(na)=|G_{\text{eff}}(na, 0, 0.6\pi c/a)|^2$  an den diskreten Punkten der die Quelle umgebenden  $\delta$ -Streuer bei  $x=na$  mit  $n \in \mathbb{Z}$  und  $\omega a/2\pi c=0.3$ .  $G_{\text{eff}}$  ist durch (6.33) gegeben. Gezeigt wird  $f(na)$  dabei für zwei verschiedene Absorptionen  $\alpha=0.2a+i0.007a$  und  $\alpha=0.2a+i0.01a$ . Im Unendlichen nähert sich das Feld oder hier die GREENS-Funktion asymptotisch der Null. Das Profil der aus den diskreten Punkten  $f(na)$  entstehenden Kurven erinnert stark an das Wahrscheinlichkeitsprofil für den gebundenen Zustand des SCHRÖDINGERSchen Materiefeldes durch ein attraktives  $\delta$ -Potential.

dabei ist der durch die Lösung  $G_0(x, x', \omega)$  eingehende Term das von der Quelle effektiv in die Potentialschwelle abgestrahlte Feld und  $\xi_j, \zeta_j$  mit  $j \in \{0, 1\}$  die durch die Reflexionen und Transmissionen an den Trennflächen der durch die Potentiale beschriebenen Dielektrika hervorgehenden Anteile. Beachtet man die Definition von  $\hat{\mathbf{T}}_{\square}^L$ , dann ergibt sich für den Fall, daß der Beobachter mit  $x < x' - \varepsilon/2$  sich in der linken Einheitszelle neben der Schwelle befindet:

$$\begin{pmatrix} \xi_{-1} \\ \zeta_{-1} \end{pmatrix} = \hat{\mathbf{T}}_{\square}^L \begin{pmatrix} \xi_0 \\ \zeta_0 - \frac{\exp[i\omega n(\omega)(x' - ma)]}{2i\omega n(\omega)} \end{pmatrix} \quad . \quad (6.25)$$

Das von der Quelle aus der Potentialschwelle abgestrahlte Feld befindet sich nicht im freien Raum. Der linke und rechte Halbraum wird durch zwei *Kristalle* im Abstand  $a - \varepsilon/2$  vom Zentrum der Schwelle bei  $x=ma$  ausgefüllt. Für die durch die unendlich ausgedehnte Struktur reflektierten Anteile des Strahlungsfeldes ist der Reflexionskoeffizient nach (B5) gegeben, der im speziellen Fall eines durch Punkt- oder  $\delta$ -Streuer gebildeten Systems auf die Form (5.10) gebracht werden kann. Da sich die Streuer in dem hier verwendeten Modell alle bei dem Vielfachen der Periode  $a$  befinden, muß nach 5.2 eine zusätzliche Phase von  $-\omega a/2$  mit berücksichtigt werden. Das Strahlungsfeld kann dann für die Amplituden links und rechts von

der Schwelle auf

$$\begin{pmatrix} \xi_1 \\ \zeta_1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \xi_1 \\ \xi_1 \mathcal{R}(\omega) \exp[i\omega(a - \varepsilon)] \end{pmatrix}, \quad (6.26)$$

$$\begin{pmatrix} \xi_{-1} \\ \zeta_{-1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \zeta_{-1} \mathcal{R}(\omega) \exp[i\omega(a - \varepsilon)] \\ \zeta_{-1} \end{pmatrix} \quad (6.27)$$

vereinfacht werden. Eigentlich ist  $\mathcal{R}(\omega)$  dabei der Reflexionskoeffizient für den rechten Halbraum. Die Anordnung der Kristalle links und rechts der Schwelle ist aber symmetrisch gewählt, so daß man  $\mathcal{R}(\omega)$  auch für den linken Halbraum verwenden kann. Zusammen mit (6.24) und (6.25) ergibt sich somit ein Gleichungssystem in  $\mathbb{C}$  mit 4 Unbekannten und 4 Gleichungen. Löst man dieses System in den neuen Abhängigkeiten auf,

$$\xi_j = \xi_j(x', 0) = \xi_j[x', 0, n(\omega, \varepsilon), \varepsilon, \omega], \quad j \in \{0, 1\},$$

$$\zeta_j = \zeta_j(x', 0) = \xi_j[x', 0, n(\omega, \varepsilon), \varepsilon, \omega], \quad j \in \{0, -1\},$$

so kann die Strahlungsquelle auf einen Punktstreuer bei  $x'=ma$  fixiert werden, indem der Grenzübergang  $\varepsilon \rightarrow 0$

mit dem durch (6.23) definierten Brechungsindex vollzogen wird. Weil der Brechungsindex (6.23) in diesem Fall divergiert, ist das Grenzverhalten der mit den Termen  $\varepsilon \cdot n(\omega, \varepsilon)$  verknüpften Amplituden für eine feste Polarisierbarkeit  $\alpha$  der Punktstreuer nicht ohne weiteres bestimmbar, deshalb entwickelt man diese in  $\sigma = \sqrt{\varepsilon}$ ,

$$\xi_j = \xi_j[y\sigma^2 + ma, 0, \sqrt{\alpha/\sigma^2 + 1}, \sigma^2, \omega],$$

$$\zeta_j = \zeta_j[y\sigma^2 + ma, 0, \sqrt{\alpha/\sigma^2 + 1}, \sigma^2, \omega].$$

( $j \in \{-1, 0, 1\}$ )

Für kleine  $\sigma$  ist die nullte Ordnung in jedem Fall führend. Da mit dem Limes  $\sigma \rightarrow 0$  für die Quelle bei  $x'$  auch  $x' = x'(\varepsilon) \rightarrow ma$  folgt, soll  $x'$  für ein  $y$  mit  $-1 < y < 1$  in der Weise gegen den Punktstreuer bei  $ma$  gehen, daß  $x' = y\sigma^2 + ma$  gilt. Die Entwicklung kann algebraisch sehr aufwendig werden, die Amplituden  $\zeta_1$  und  $\xi_{-1}$  können dabei mit  $\varepsilon = 0$  aus  $\xi_1$  und  $\zeta_{-1}$  durch (6.26) sowie (6.27) gewonnen werden. Hat man eine Entwicklung in  $\sigma$  gefunden, so zeigt sich, daß mit

$$(\sigma^2\omega)(\alpha\omega) \ll 1$$

alle höheren Ordnungen im Limes  $\varepsilon \rightarrow 0$  verschwinden. In nullter Ordnung findet man folgende Amplituden:

$$\xi_0(ma, 0) = \xi_0 = \zeta_0 = -\frac{1}{2\omega} \left\{ \frac{[1 + \mathcal{R}(\omega)e^{i\omega a}]^2}{2i[1 - \mathcal{R}^2(\omega)e^{2i\omega a}] + \alpha\omega[1 + \mathcal{R}(\omega)e^{i\omega a}]^2} \right\} + O(\sigma),$$

$$\zeta_{-1}(ma, 0) = \zeta_{-1} = -\frac{1}{\omega} \left\{ \frac{1 + \mathcal{R}(\omega)e^{i\omega a}}{2i[1 - \mathcal{R}^2(\omega)e^{2i\omega a}] + \alpha\omega[1 + \mathcal{R}(\omega)e^{i\omega a}]^2} \right\} + O(\sigma^2) = \xi_{-1} \frac{e^{-i\omega a}}{\mathcal{R}(\omega)} + O(\sigma^2), \quad (6.28)$$

$$\xi_1(ma, 0) = \xi_1 = -\frac{1}{\omega} \left\{ \frac{1 + \mathcal{R}(\omega)e^{i\omega a}}{2i[1 - \mathcal{R}^2(\omega)e^{2i\omega a}] + \alpha\omega[1 + \mathcal{R}(\omega)e^{i\omega a}]^2} \right\} + O(\sigma^2) = \zeta_1 \frac{e^{-i\omega a}}{\mathcal{R}(\omega)} + O(\sigma^2). \quad (6.29)$$

Die Amplituden  $\xi_0$  und  $\zeta_0$  innerhalb der Schwelle spielen dabei, wie bereits erwähnt, keine Rolle mehr, da die Schwelle im Limes verschwindet. Man kann aber mit (6.22) nachprüfen, daß an der Stelle  $x=ma$  des Streuers bzw. der Quelle die Felder stetig sind,

$$\xi_1 + \zeta_1 = \xi_0 + \zeta_0 = \xi_{-1} + \zeta_{-1}.$$

Die GREENs-Funktion (6.20) reduziert sich auf die Lösungen des Feldes in den Einheitszellen links und rechts der nun auf einem Punktstreuer sitzenden Quelle bei  $x'=ma$ . Wenn man das Gebiet zunächst auf die beiden Einheitszellen neben dem Streuer beschränkt, erhält man damit für die effektive GREENs-Funktion bzw. das abgestrahlte Feld:

$$G_{\text{eff}}(x, ma, \omega) = -\frac{1}{\omega} \left\{ \frac{e^{i\omega|x-ma|} + e^{2i\omega a} \mathcal{R}^2(\omega) e^{-i\omega|x-ma|} + 2\mathcal{R}(\omega) e^{i\omega a} \cos[\omega(x-ma)]}{2i[1 - \mathcal{R}^2(\omega) e^{2i\omega a}] + \alpha\omega[1 + \mathcal{R}(\omega) e^{i\omega a}]^2} \right\} \Theta_a^0(x, m). \quad (6.30)$$

Die GREENS-Funktion (6.30) hängt nur im Nenner direkt von der Polarisierbarkeit ab. Wenn die Polarisierbarkeit verschwindet,  $\alpha \rightarrow 0$ , befindet sich die Quelle zwischen den Kristallen an der Stelle  $x'=ma$  wieder im Vakuum bzw. *freien* Raum. Man kann daher den Term

$$\alpha\omega[1 + \mathcal{R}(\omega) e^{i\omega a}]^2$$

im Nenner von (6.30) als eine Lokalfeldkorrektur verstehen, die den Einfluß beschreibt, den der  $\delta$ -Streuer, auf dem sich die Quelle befindet, auf das abgestrahlte Feld hat.

Die Punktquelle bleibt auf den Ort des Streuers bei  $x'=ma$  fixiert. Die Reziprozität kann mit (6.11) nicht nachgeprüft werden. Mit der Forderung (2.13) für die Dielektrizitätsfunktion (5.1) folgt für die Polarisierbarkeit:

$$\alpha(-\omega) = \alpha^*(\omega).$$

Für den Eigenwert (5.9) der Transfermatrix eines  $\delta$ -Streuers folgt daraus:

$$\lambda^*(\omega) = \lambda(-\omega).$$

Mit (5.10) aus 5.2 ergibt sich somit für den Reflexionskoeffizienten  $\mathcal{R}(\omega)$ :

$$\mathcal{R}^*(\omega) = \mathcal{R}(-\omega)$$

bzw. für die Amplituden (6.28) und (6.29):

$$\xi_j^*(\omega) = \xi_j(-\omega), \quad \zeta_j^*(\omega) = \zeta_j(-\omega), \quad j \in \{1, -1\}$$

oder direkt für die GREENS-Funktion (6.30):

$$G_{\text{eff}}^*(x, ma, \omega) = G_{\text{eff}}(x, ma, -\omega),$$

wodurch sich die Eigenschaft (6.12) direkt überprüfen läßt. Die Amplituden (6.28) und (6.29) sind sehr unhandlich, man kann sie mit Hilfe der dritten binomischen Formel und (5.10) vereinfachen zu:

$$\xi_1 = \zeta_{-1} = -\frac{1}{2i\omega} \frac{\lambda_+(\omega) - e^{-i\omega a}}{2\lambda_+(\omega) - 2\cos(\omega a) + \alpha\omega \sin(\omega a)}, \quad (6.31)$$

$$\zeta_1 = \xi_{-1} = -\frac{1}{2i\omega} \frac{e^{i\omega a} - \lambda_+(\omega)}{2\lambda_+(\omega) - 2\cos(\omega a) + \alpha\omega \sin(\omega a)}. \quad (6.32)$$

### 6.2.2. Fortsetzung in den Halbraum

Da die GREENS-Funktion wieder eine Lösung der Wellengleichung ist, kann man wieder auf die Transfermatrix

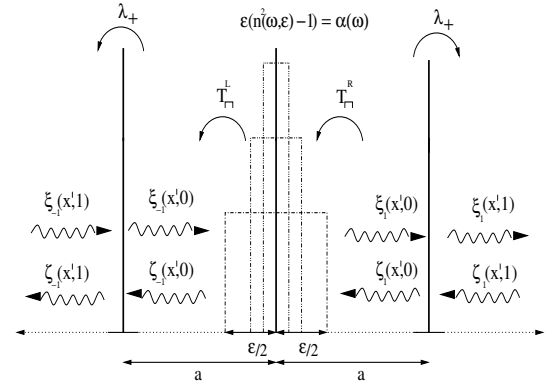


Abbildung 11: Das von der in der Potentialschwelle sitzenden Punktquelle in die linke und rechte Einheitszelle neben der Schwelle abgestrahlte Feld kann mit Hilfe der Transfermatrix in den linken und rechten Halbraum fortgesetzt werden. Die Bestimmung der Amplituden  $\xi_j(x', 0)$  und  $\zeta_j(x', 0)$  in der Nähe der Schwelle erfolgt dabei mit Hilfe der Transporter  $\hat{\mathbf{T}}_{\Pi}^L$  und  $\hat{\mathbf{T}}_{\Pi}^R$ . Die Notation der Amplituden  $\xi_j(x', l)$  und  $\zeta_j(x', l)$  ist dabei so gewählt, daß mit  $j \in \{-1, 1\}$  der jeweilige Halbraum vorgegeben wird, in dem man sich um Vielfache  $l > 0$  der Periode  $a$  von der Quelle entfernt befindet.

zurückgreifen, um die GREENS-Funktion mit den Amplituden (6.28) und (6.29) in den linken bzw. rechten Halbraum fortzusetzen (siehe Abb.11). Es ist ein Leichtes nachzuprüfen, daß die Amplituden  $\xi_1$  und  $\zeta_1$  einen Eigenvektor zum Eigenwert  $\lambda_+$  der Transfermatrix (5.5) aus 5.1 bilden,

$$\hat{\mathbf{T}}_{\delta} \begin{pmatrix} \xi_1 \\ \zeta_1 \end{pmatrix} = \lambda_+ \begin{pmatrix} \xi_1 \\ \zeta_1 \end{pmatrix}.$$

Aufgrund der Spiegelsymmetrie sind die Amplituden  $\xi_{-1}$  und  $\zeta_{-1}$  dann Eigenvektoren zum Eigenwert  $\lambda_+$  der Matrix  $(\hat{\mathbf{T}}_{\delta})_S$ ,

$$(\hat{\mathbf{T}}_{\delta})_S \begin{pmatrix} \xi_{-1} \\ \zeta_{-1} \end{pmatrix} = \lambda_+ \begin{pmatrix} \xi_{-1} \\ \zeta_{-1} \end{pmatrix}.$$

Mit Hilfe von  $\lambda_+$  lassen sich die Amplituden  $\xi_j(ma, l)$  und  $\zeta_j(ma, l)$  in (6.22) weiterhin in folgender Weise bequem ausdrücken:

$$\xi_j(ma, l) = (\lambda_+)^l \xi_j(ma, 0) e^{-i\omega a \cdot (jl)},$$

$$\zeta_j(ma, l) = (\lambda_+)^l \zeta_j(ma, 0) e^{i\omega a \cdot (jl)}.$$

Geht man davon aus, daß sich in der nun im gesamten Raum ausgedehnten Struktur zunächst  $2N + 1$  Streuer mit  $m \in \{-N, \dots, 0, \dots, N\}$  befinden, so erhält man letztendlich für die effektive GREENS-Funktion:

$$G_{\text{eff}}(x, ma, \omega) = \sum_{j \in \{1, -1\}} \sum_{l=0}^{N-jm} (\lambda_+)^l \{ \xi_j \exp[\imath \omega(x - ma - jla)] + \zeta_j \exp[-\imath \omega(x - ma - jla)] \} \Theta_0^j(x, m + jl) . \quad (6.33)$$

Mit  $N \rightarrow \infty$  wird das Modell wieder vervollständigt. Der Eigenwert  $\lambda_+$  ist dabei mit (5.9) so gewählt, daß er für  $\Im(\alpha) > 0$  innerhalb des Einheitskreises liegt,

$$\lim_{l \rightarrow \infty} |\lambda_+|^l \rightarrow 0 \quad , \quad \Im(\alpha) > 0 .$$

Das Strahlungsfeld erfüllt also die Strahlungsbedingung und verschwindet im Unendlichen, solange ein Mindestmaß an Absorption vorhanden ist (siehe Abb.10),

### 6.3. Das freie Strahlungsfeld als Grenzfall

Für den Fall des Strahlungsfeldes im ansonsten leeren Raum,  $\epsilon(\omega)=1$ , sind ebene Wellen Lösungen der dann entstehenden HELMHOLTZ-Gleichung (6.2). Betrachtet man zunächst ein endliches Quantisierungsvolumen  $L$  und nimmt periodische Randbedingungen an, so ist unschwer zu sehen, daß sich das Feld mit (6.8) auf die bekannte Form

$$\hat{\mathbf{E}}(x) = \imath \sum_k \sqrt{\frac{\omega_k}{2L}} e^{\imath \omega_k x} \hat{\mathbf{a}}_k + \text{h. c.} \quad (6.34)$$

bringen läßt, wobei die diskreten Wellenzahlvektoren durch

$$k = 2\pi \frac{l}{L} \quad , \quad l \in \mathbb{Z}$$

festgelegt werden und die Bandlücken verschwinden. Der Übergang zum unendlich ausgedehnten, freien Raum und dem entsprechenden Modenkontinuum ( $\omega^2 = k^2$ ) mit  $L \rightarrow \infty$ , führt von einer FOURIER-Reihe auf ein FOURIER-Integral und man erhält:

$$\hat{\mathbf{E}}(x) = \imath \int_0^\infty d\omega \sqrt{\frac{\omega}{4\pi}} \{ e^{\imath \omega x} \hat{\mathbf{a}}^{+1}(\omega) + e^{-\imath \omega x} \hat{\mathbf{a}}^{-1}(\omega) \} + \text{h. c.} , \quad (6.35)$$

wobei im Gegensatz zur Darstellung (6.34) die Richtung der sich ausbreitenden Moden jetzt explizit durch zwei neue Operatoren  $\hat{\mathbf{a}}^{+1}$  und  $\hat{\mathbf{a}}^{-1}$  mit berücksichtigt werden muß, die den bosonischen Vertauschungsrelationen genügen,

$$[\hat{\mathbf{a}}^{\pm 1}(\omega), (\hat{\mathbf{a}}^{\pm 1})^\dagger(\omega')] = \delta(\omega - \omega') .$$

Wenn die Polarisierbarkeit mit  $\alpha \rightarrow 0$  verschwindet, gilt das auch für die Inhomogenität in der Dielektrizitätsfunktion. Die bekannte Modenzerlegung für das freie

Strahlungsfeld muß also auch in dieser Näherung aus (6.16) hervorgehen. Dazu fasse man alle ortsabhängigen und frequenzabhängigen Anteile in (6.16) mit

$$\hat{\mathbf{E}}(x) = \imath \int_0^\infty d\omega \sqrt{\frac{\omega}{4\pi}} \hat{\mathbf{a}}(x, \omega) + \text{h. c.}$$

zu einem neuen Operator

$$\hat{\mathbf{a}}(x, \omega) = \sqrt{4\Im(\alpha)\omega^3} \sum_m G_{\text{eff}}(x, ma, \omega) \hat{\mathbf{f}}_m(\omega)$$

zusammen. Weil die effektive GREENS-Funktion (6.33) die Kommutatorrelation (6.19) erfüllen muß, sind die neuen Vertauschungsrelationen der Operatoren  $\hat{\mathbf{a}}(x, \omega)$  zusammen mit (6.15) durch

$$[\hat{\mathbf{a}}(x, \omega), \hat{\mathbf{a}}^\dagger(x', \omega')] = 2\pi \delta(x - x') \delta(\omega - \omega')$$

gegeben. Wenn der Beobachter des Strahlungsfeldes (6.16) auf das Gebiet in der Einheitszelle neben dem Streuer bei  $x=\nu a$  beschränkt bleibt, vereinfacht sich die effektive GREENS-Funktion (6.33) zu:

$$G_{\text{eff}} = \begin{cases} (\lambda_+)^{\nu-m} A_\nu(x, \omega) \Theta^1(x, \nu) & : m \leq \nu \\ (\lambda_+)^{m-\nu-1} A_{-\nu-1}(-x, \omega) & \\ \quad \times \Theta^{-1}(x, \nu+1) & : m > \nu , \end{cases} \quad (6.36)$$

wobei wegen  $\xi_1 = \zeta_{-1}$

$$A_\nu(x, \omega) = \xi_1 e^{\imath \omega(x-\nu a)} + \zeta_1 e^{-\imath \omega(x-\nu a)}$$

gelten soll, womit sich für  $\hat{\mathbf{a}}_\nu(x, \omega)$  ergibt:

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{a}}_\nu(x, \omega) &= 2\omega A_\nu(x, \omega) \sqrt{\Im(\alpha)\omega} \\ &\quad \times \sum_{m=-\infty}^{\nu} (\lambda_+)^{\nu-m} \hat{\mathbf{f}}_m(\omega) \Theta^1(x, \nu) \\ &\quad + 2\omega A_{-\nu-1}(-x, \omega) \sqrt{\Im(\alpha)\omega} \\ &\quad \times \sum_{m=\nu+1}^{\infty} (\lambda_+)^{m-\nu-1} \hat{\mathbf{f}}_m(\omega) \Theta^{-1}(x, \nu+1) . \end{aligned}$$

Damit eine Modenentwicklung nach (6.35) möglich wird, muß  $\hat{\mathbf{a}}(x, \omega)$  ortsunabhängig werden. Man kann also den Operator  $\hat{\mathbf{a}}_\nu(x, \omega)$  durch

$$\hat{\mathbf{a}}_\nu(x, \omega) = \frac{2\omega}{\imath} A_\nu(x, \omega) \hat{\mathbf{a}}_\nu^1(\omega) + \frac{2\omega}{\imath} A_{-\nu-1}(-x, \omega) \hat{\mathbf{a}}_\nu^{-1}(\omega)$$



in der Weise separieren, daß mit

$$\hat{\mathbf{a}}_\nu^1(\omega) = \imath\sqrt{\Im(\alpha)\omega} \sum_{m=0}^{\infty} (\lambda_+)^m \hat{\mathbf{f}}_{\nu-m}(\omega) \Theta^1(x, \nu)$$

und

$$\hat{\mathbf{a}}_\nu^{-1}(\omega) = \imath\sqrt{\Im(\alpha)\omega} \sum_{m=0}^{\infty} (\lambda_+)^m \hat{\mathbf{f}}_{m+\nu+1}(\omega) \Theta^{-1}(x, \nu+1)$$

zwei neue Vernichter eingeführt werden können, wobei  $\hat{\mathbf{a}}_\nu^1$  und  $\hat{\mathbf{a}}_\nu^{-1}$  jeweils *lokal* in der Einheitszelle ein sich in unterschiedliche Richtungen ausbreitenden Eigenvektor der Transfermatrix mit entsprechender Frequenz vernichten. Sie müssen die bosonischen Vertauschungsrelationen erfüllen. Mit (6.14) ist unschwer nachzuvollziehen, daß

$$[\hat{\mathbf{a}}_\nu^{\pm 1}(\omega), (\hat{\mathbf{a}}_{\nu'}^{\pm 1})^\dagger(\omega')] = [\hat{\mathbf{a}}_\nu^{\pm 1}(\omega), (\hat{\mathbf{a}}_{\nu'}^{\mp 1})^\dagger(\omega')] = 0$$

erfüllt wird. Für die Vertauschungsrelation zwischen den Vernichtern und den entsprechenden Erzeugern ergibt sich mit (6.15):

$$\begin{aligned} [\hat{\mathbf{a}}_\nu^{\pm 1}(\omega), (\hat{\mathbf{a}}_{\nu'}^{\pm 1})^\dagger(\omega')] &= \Im(\alpha)\omega \delta(\omega - \omega') \quad (6.37) \\ &\quad \times \sum_{m=0}^{\infty} |\lambda_+|^{2m} \delta_{\nu\nu'} \\ &= \frac{\Im(\alpha)\omega}{1 - |\lambda_+|^2} \delta_{\nu\nu'} \delta(\omega - \omega') , \end{aligned}$$

wobei in der zweiten Zeile von der geometrischen Reihe Gebrauch gemacht worden ist.

Verschwundet mit  $\Im(\alpha)=0$  die Absorption, dann befindet sich der Eigenwert  $\lambda_+$  auf dem Einheitskreis. Es ist also in der Tat zu erwarten, daß die Kommutatorrelation für Bosonen im Limes  $\alpha \rightarrow 0$  erfüllt werden kann. Eine Entwicklung des Eigenwertes  $\lambda_+$  in erster Ordnung in  $\alpha$  führt auf:

$$\begin{aligned} \lambda_+ &= \left(1 + \imath\frac{\omega\alpha}{2}\right) e^{\imath\omega a} + O(\alpha^2) \\ &= \left(\hat{\mathbf{T}}_\delta\right)_{11} + O(\alpha^2) , \end{aligned}$$

oder speziell auf das Betragsquadrat:

$$|\lambda_+|^2 = 1 - \Im(\alpha)\omega + O(\alpha^2) .$$

Die Entwicklung in (6.37) eingesetzt, bestätigt nach dem Grenzübergang die Vertauschungsrelation der Bosonen,

$$[\hat{\mathbf{a}}_\nu^{\pm 1}(\omega), (\hat{\mathbf{a}}_{\nu'}^{\pm 1})^\dagger(\omega')] \stackrel{\Im(\alpha) \rightarrow 0}{=} \delta_{\nu\nu'} \delta(\omega - \omega') .$$

Was bleibt, ist den Grenzfall für  $A_\nu(x, \omega)$  zu untersuchen. Die in  $A_\nu(x, \omega)$  zusammengefaßten Ausdrücke stellen die von den auf den Punktstreuern sitzenden Punktquellen abgestrahlten Felder dar, welche bis in die Einheitszelle

bei  $x = \nu a$  fortgesetzt und aufintegriert werden müssen. Es wäre falsch die durch

$$\tilde{A}_\nu(x, \omega) = -2\omega\imath A_\nu(x, \omega)$$

definierten Funktionen für kleine  $\alpha$  bereits als Blochmoden bzw. als die Modenfunktionen einer entsprechenden Modenzerlegung zu interpretieren. Dazu wäre die Näherung  $\Re(\alpha) \gg \Im(\alpha)$  erforderlich. Die durch  $\hat{\mathbf{a}}_\nu^1(\omega)$  und  $\hat{\mathbf{a}}_\nu^{-1}(\omega)$  definierten Operatoren, kann man in diesem Fall nicht mehr so einfach als die Erzeuger und Vernichter der Moden des in dieser Näherung absorptionsfreien Feldes interpretieren, da mit  $\Re(\alpha) \gg \Im(\alpha)$  der Vorfaktor in (6.37) verschwinden kann,

$$\lim_{\Im(\alpha) \rightarrow 0} \frac{\Im(\alpha)\omega}{1 - |\lambda_+|^2} = 0 \quad , \quad \Re(\alpha) \neq 0 ,$$

weil dessen Nenner im Limes  $\Im(\alpha) \rightarrow 0$  für bestimmte Frequenzen  $\omega'$  immer schwächer gegen null konvergiert als dessen Zähler und damit die bosonischen Vertauschungsrelationen nicht mehr ohne weiteres erfüllt werden können.

Der Eigenwert  $\lambda_+$  der Transfermatrix eines  $\delta$ -Streuers reduziert sich im Fall verschwindender Polarisierbarkeit nach (5.9) auf:

$$\lambda_+ = e^{\imath\omega a} .$$

Für die Amplituden in  $\tilde{A}_\nu(x, \omega)$  folgt aus (6.31) und (6.32):

$$\xi_1 = \zeta_{-1} = \frac{\imath}{2\omega} \quad , \quad \xi_{-1} = \zeta_1 = 0 . \quad (6.38)$$

Letztendlich bleiben im Limes  $\alpha \rightarrow 0$  von  $\tilde{A}_\nu(x, \omega)$  die Modenfunktionen des freien Strahlungsfeldes im Vakuum übrig und man erhält tatsächlich wieder eine Modenzerlegung nach (6.35),

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{E}}_\nu(x) &= \imath \int_0^\infty d\omega \sqrt{\frac{\omega}{4\pi}} \left\{ e^{\imath\omega(x-\nu a)} \hat{\mathbf{a}}_\nu^1(\omega) \right. \\ &\quad \left. + e^{-\imath\omega(x-\nu a-a)} \hat{\mathbf{a}}_\nu^{-1}(\omega) \right\} + \text{h. c.} , \end{aligned} \quad (6.39)$$

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{A}}_\nu(x) &= \int_0^\infty d\omega \sqrt{\frac{1}{4\pi\omega}} \left\{ e^{\imath\omega(x-\nu a)} \hat{\mathbf{a}}_\nu^1(\omega) \right. \\ &\quad \left. + e^{-\imath\omega(x-\nu a-a)} \hat{\mathbf{a}}_\nu^{-1}(\omega) \right\} + \text{h. c.} , \end{aligned}$$

die die fundamentale Vertauschungsrelation

$$[\hat{\mathbf{A}}_\nu(x), \hat{\mathbf{E}}_{\nu'}(x')] = -\imath\delta_{\nu\nu'} \delta(x - x')$$

erfüllen kann.

#### 6.4. Modenzerlegung

Wie bereits zuvor erwähnt, ist die Modenzerlegung nur eine Näherung, die für Frequenzen des Strahlungsfeldes in entsprechend schmalen Intervallen verwendet wird, in denen die Absorption vernachlässigt werden kann,

$$\Re(\alpha) \gg \Im(\alpha) .$$

Die Modenzerlegung selbst geschieht in Analogie zu der Beschreibung des freien, quantisierten Strahlungsfeldes im Vakuum. Jedes homogene und inhomogene Medium darf dabei nur eine Dispersion aufweisen, die die KRAMERS-KRONIG-Relationen nicht verletzt. Wie im vorherigen Abschnitt gezeigt, ist die einfache Forderung  $\alpha \rightarrow 0$  nicht ausreichend, um den Feldoperator (6.16) auch für den konkreten Fall verschwindender Absorption in entsprechende Modenfunktionen und dazugehörige Photonenoperatoren bzw. Erzeuger und Vernichter zu zerlegen. Die Modenfunktionen sind allerdings schon bekannt, wenn man um die übertragene Bedeutung der Transfermatrix als Translationsoperator weiß.

##### 6.4.1. Zur Modenfunktion

Der Operator  $\hat{\Theta}_E$  aus (2.24), der sich im Fall absorptionsfreier Medien aus der homogenen Wellengleichung mit veränderlicher Phasengeschwindigkeit ergibt, besitzt die Symmetriegruppe der diskreten Translationen  $\mathfrak{S}$ . Die Eigenvektoren der in dieser Gruppe liegenden Transfermatrizen in der Basis der einlaufenden und auslaufenden ebenen Wellen sind daher nach 4.3 mit den Modenfunktionen  $A(x, \omega)$  identisch. Die Transfermatrizen in  $\mathfrak{S}$  verschieben das Feld im Gitter immer um das Vielfache der Periode  $a$ . Die sich aus den unterschiedlichen Transfermatrizen in  $\mathfrak{S}$  ergebenden Eigenvektoren erfordern daher eine zusätzliche Bedingung, mit deren Hilfe sie in der entsprechenden Basis zu allgemein gültigen Modenfunktionen normiert werden können.

Um die Ergebnisse mit dem vorherigen Abschnitt direkt vergleichen zu können, konzentrierte man sich wieder auf das Gebiet der Einheitszelle neben dem Streuer bei  $x = \nu a$  und quantisiere das Strahlungsfeld in Anlehnung an (6.8) direkt durch

$$\hat{\mathbf{E}}_\nu(x) = \imath \int_{\Delta\omega} d\omega \sqrt{\frac{\omega}{4\pi}} [A_\nu^+(x, \omega) \hat{\mathbf{a}}_\nu^{+1}(\omega) + A_\nu^-(x, \omega) \hat{\mathbf{a}}_\nu^{-1}(\omega)] + \text{h. c.} , \quad (6.40)$$

$$\hat{\mathbf{A}}_\nu(x) = \int_{\Delta\omega} d\omega \sqrt{\frac{1}{4\pi\omega}} [A_\nu^+(x, \omega) \hat{\mathbf{a}}_\nu^{+1}(\omega) + A_\nu^-(x, \omega) \hat{\mathbf{a}}_\nu^{-1}(\omega)] + \text{h. c.} . \quad (6.41)$$

Dabei sind wieder mit  $\hat{\mathbf{a}}_\nu^{\pm 1}$  und  $(\hat{\mathbf{a}}_\nu^{\pm 1})^\dagger$  die ortsunabhängigen Vernichter und Erzeuger eingeführt worden, welche lokal pro Einheitszelle ein entsprechendes Quant erzeugen

oder vernichten mögen. Die erlaubten Frequenzen seien irgendwo in einem Band auf das schmale Intervall  $\Delta\omega$  um die Mittelfrequenz  $\omega_0$  begrenzt,

$$\omega_0 - \frac{\Delta\omega}{2} < \omega < \omega_0 + \frac{\Delta\omega}{2} ,$$

wobei  $\Delta\omega \ll \omega_0$  vorausgesetzt werden darf. Da ausschließlich mit positiven Frequenzen gearbeitet wird, müssen im Gegensatz zu der Darstellung (6.8) des Strahlungsfeldes, in der durch das Vorzeichen des Pseudoimpulses  $k$  die Richtung mit berücksichtigt werden kann, die in unterschiedliche Richtungen propagierenden Moden extra durch zwei separate Photonenoperatoren  $\hat{\mathbf{a}}_\nu^{\pm 1}$  und dazugehörige Modenfunktionen  $A^\pm(x, \omega)$  wieder in Erscheinung treten. Mit  $A^+(x, \omega)$  sollen dabei die Modenfunktionen der relativ zum Streuer nach rechts propagierenden Moden bezeichnet werden. Diese lassen sich unter Verwendung von Punkt- bzw.  $\delta$ -Streuern durch die Eigenvektoren zum Eigenwert  $\lambda_+$  der Transfermatrix  $\hat{\mathbf{T}}_\delta$  aus (5.5) relativ leicht bestimmen. Für die Modenfunktionen  $A^-(x, \omega)$  der entgegengesetzten Richtung im Gitter muß man wieder aufgrund der Spiegelsymmetrie die Eigenvektoren zum gleichen Eigenwert  $\lambda_+$  der Transfermatrix  $(\hat{\mathbf{T}}_\delta)_S$  verwenden. Für die Modenfunktionen findet man unter Beachtung der richtig zu wählenden Basis der ein- und auslaufenden Wellen:

$$A_\nu^+(x, \omega) = \left( \frac{\lambda_+ - e^{-\imath\omega a}}{N(\omega)} \right) e^{\imath\omega(x-\nu a)} + \left( \frac{e^{\imath\omega a} - \lambda_+}{N(\omega)} \right) e^{-\imath\omega(x-\nu a)} , \quad (6.42)$$

$$A_\nu^-(x, \omega) = \left( \frac{e^{\imath\omega a} - \lambda_+}{N(\omega)} \right) e^{\imath\omega(x-\nu a-a)} + \left( \frac{\lambda_+ - e^{-\imath\omega a}}{N(\omega)} \right) e^{-\imath\omega(x-\nu a-a)} , \quad (6.43)$$

wobei natürlich für die Modenfunktionen wieder

$$A_\nu^-(x, \omega) = A_{-\nu-1}^+(-x, \omega)$$

gilt. Normiert man die Modenfunktion mit (6.9) auf die Ausdehnung einer Einheitszelle bzw. die Periode  $a$  des Gitters, so findet man für die Normierungskonstante (siehe C):

$$N(\omega) = \sqrt{2} \sin(\omega a) \sqrt{\frac{\alpha}{a} + 2 + \omega \alpha \cot(\omega a)} .$$

Weil man schwache Absorption voraussetzt, soll dabei immer  $\alpha \in \{\mathbb{R}^+ + \imath 0\}$  gelten und  $\lambda_+$  auf dem Einheitskreis liegen. Das diese Forderung legitim ist, läßt sich leicht nachprüfen. Aus der KRAMERS-KRONIG-Relation (2.15) und der Dielektrizitätsfunktion (5.1) folgt für eine Polarisierbarkeit  $\alpha(\omega)$ :

$$\Re[\alpha(\omega)] = \frac{\mathcal{P}}{\pi} \int d\tilde{\omega} \frac{\Im[\alpha(\tilde{\omega})]}{(\tilde{\omega} - \omega)} .$$

Wenn man Absorption nur auf einem schmalen Band erlaubt,

$$\Im[\alpha(\omega)] = f(\omega)\delta(\omega - \omega_0),$$

ergibt sich:

$$\left| \frac{\partial \Re[\alpha(\omega)]}{\partial \omega} \right| = \left| \frac{\Re[\alpha(\omega)]}{\omega_0 - \omega} \right|.$$

Da man

$$1 \gg \left| \frac{\Delta\omega}{\omega_0 - \omega} \right| = \left| \frac{\Delta\omega}{\Re[\alpha(\omega)]} \right| \left| \frac{\partial \Re[\alpha(\omega)]}{\partial \omega} \right|$$

fordert, kann man beliebige, in der Regel frequenzunabhängige Polarisierbarkeiten  $\alpha \in \{\mathbb{R}^+ + i0\}$  verwenden.

#### 6.4.2. Erzeuger und Vernichter in der Quasinäherung

Das Verfahren der Modenzerlegung darf wieder abgeschlossen werden, wenn die jeweiligen Photonoperatoren die bosonischen Vertauschungsrelationen erfüllen können. Dazu ist es notwendig die Operatoren  $\hat{\mathbf{a}}_\nu^{\pm 1}$  wieder als eine Überlagerung der bosonischen Felder  $\hat{\mathbf{f}}_m$  zu formulieren mit Hilfe derer Eigenschaften im Grenzfalle die Vertauschungsrelationen zu zeigen sind.

Die Amplituden  $\xi_1, \zeta_1$  bzw.  $\xi_{-1}, \zeta_{-1}$  aus (6.31) und (6.32) in den ortsabhängigen Funktionen  $A_\nu(x, \omega)$  der

effektiven GREENS-Funktion (6.36) sind ebenfalls Eigenvektoren der Transfermatrizen  $\hat{\mathbf{T}}_\delta$  und  $(\hat{\mathbf{T}}_\delta)_S$ . Formal kann man daher die Funktionen  $A_\nu(x, \omega)$  und  $A_{-\nu-1}(-x, \omega)$  in der GREENS-Funktion (6.36) als eine Superposition der beiden Modenfunktionen  $A_\nu^+(x, \omega)$  und  $A_\nu^-(x, \omega)$  darstellen,

$$A_\nu(x, \omega) = c_1 A_\nu^+(x, \omega) + c_2 A_\nu^-(x, \omega),$$

$$A_{-\nu-1}(-x, \omega) = d_1 A_\nu^+(x, \omega) + d_2 A_\nu^-(x, \omega).$$

Man könnte auch dazu geneigt sein, im Fall  $\Im(\alpha) > 0$  die Funktionen  $A_\nu(x, \omega)$  und  $A_{-\nu-1}(-x, \omega)$  als die Quasimodenfunktionen der Absorption zu bezeichnen. Dabei sollte die Normierung der Quasimodenfunktionen im Grunde schon das Ergebnis der Konstruktion der GREENS-Funktion sein.

Es sind die frequenzabhängigen Koeffizienten  $c_i$  und  $d_i$ , die die Photonoperatoren  $\hat{\mathbf{a}}^{\pm 1}$  und  $(\hat{\mathbf{a}}^{\pm 1})^\dagger$  in der Weise ergänzen können, daß sie wieder den korrekten bosonischen Vertauschungsrelationen in der Darstellung durch die bosonischen Felder  $\hat{\mathbf{f}}_m$  genügen können. Dazu nehme man wieder den Operator der elektrischen Feldstärke (6.16) unter Verwendung der effektiven GREENS-Funktion (6.36) und ersetze die Funktionen  $A_\nu(x, \omega)$  und  $A_{-\nu-1}(-x, \omega)$  durch die Superposition der jeweiligen Modenfunktionen:

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{E}}_\nu(x) &= i \int_0^\infty d\omega \sqrt{\frac{\omega}{4\pi}} \left\{ \sqrt{4\Im(\alpha)\omega^3} \sum_{m=-\infty}^\nu (\lambda_+)^{\nu-m} A_\nu(x, \omega) \hat{\mathbf{f}}_m(\omega) \Theta^1(x, \nu) \right. \\ &\quad \left. + \sqrt{4\Im(\alpha)\omega^3} \sum_{m=\nu+1}^\infty (\lambda_+)^{m-\nu-1} A_{-\nu-1}(-x, \omega) \hat{\mathbf{f}}_m(\omega) \Theta^{-1}(x, \nu+1) \right\} \\ &= i \int_0^\infty d\omega \sqrt{\frac{\omega}{4\pi}} \left\{ \underbrace{\left[ \sqrt{4\Im(\alpha)\omega^3} \sum_{m=0}^\infty (\lambda_+)^m (c_1 \hat{\mathbf{f}}_{\nu-m}(\omega) + d_1 \hat{\mathbf{f}}_{m+\nu+1}(\omega)) \Theta^1(x, \nu) \right]}_{\hat{\mathbf{a}}_\nu^{+1}(\omega)} A_\nu^+(x, \omega) \right. \\ &\quad \left. + \underbrace{\left[ \sqrt{4\Im(\alpha)\omega^3} \sum_{m=0}^\infty (\lambda_+)^m (c_2 \hat{\mathbf{f}}_{\nu-m}(\omega) + d_2 \hat{\mathbf{f}}_{m+\nu+1}(\omega)) \Theta^{-1}(x, \nu+1) \right]}_{\hat{\mathbf{a}}_\nu^{-1}(\omega)} A_\nu^-(x, \omega) \right\}. \end{aligned}$$

Durch Vergleichen der Amplituden der Modenfunktionen (6.42) und (6.43) mit den Amplituden  $\xi_1, \zeta_1$  aus (6.31) und (6.32) ergibt sich für die Koeffizienten:

$$d_1 = c_2 = 0$$

$$c_1 = d_2 = \frac{1}{\sqrt{2\omega}} \frac{\sqrt{\frac{\alpha}{a} + 2 + \omega\alpha \cot(\omega a)}}{\sqrt{4 + 4\omega\alpha \cot[\omega a] - \omega^2\alpha^2}} \quad (6.44)$$

bzw. für die Photonenoperatoren im SCHRÖDINGER-Bild:

$$\hat{\mathbf{a}}_\nu^{+1}(\omega) = c_1 \sqrt{4\Im(\alpha)\omega^3} \sum_{m=0}^{\infty} e^{ik(\omega)am} \hat{\mathbf{f}}_{\nu-m}(\omega), \quad (6.45)$$

$$\hat{\mathbf{a}}_\nu^{-1}(\omega) = c_1 \sqrt{4\Im(\alpha)\omega^3} \sum_{m=0}^{\infty} e^{ik(\omega)am} \hat{\mathbf{f}}_{m+\nu+1}(\omega). \quad (6.46)$$

Die Operatoren (6.45) und (6.46) beschreiben in der Näherung  $\Re(\alpha) \gg \Im(\alpha)$  die frequenzabhängigen Amplituden des angeregten Strahlungsfeldes in der Einheitszelle in einem eingeschränkten Intervall  $\Delta\omega$ . Klassisch werden diese Amplituden immer exponentiell weggedämpft, wenn Absorption im Gitter vorhanden ist. Für die Vertauschungsrelationen der Photonenoperatoren (6.45) und (6.46) ergibt sich wieder mit Hilfe der bereits bekannten Vertauschungsrelationen der quantisierten, bosonischen Felder  $\hat{\mathbf{f}}_m$  aus (6.14) und (6.15):

$$[\hat{\mathbf{a}}_\nu^{\pm 1}(\omega), (\hat{\mathbf{a}}_{\nu'}^{\pm 1})(\omega')] = [\hat{\mathbf{a}}_\nu^{\pm 1}(\omega), (\hat{\mathbf{a}}_{\nu'}^{\mp 1})(\omega')] \quad (6.47)$$

$$= 0,$$

$$[\hat{\mathbf{a}}_\nu^{\pm 1}(\omega), (\hat{\mathbf{a}}_{\nu'}^{\pm 1})^\dagger(\omega')] = \frac{4\omega^3\Im(\alpha)}{1 - |\lambda_+|^2} |c_1|^2 \times \delta_{\nu\nu'} \delta(\omega - \omega'). \quad (6.48)$$

Man ist nur an dem Resultat schwacher Dispersion und verschwindender Absorption interessiert. Es ist daher ausreichend für den Koeffizienten  $c_1$  die nullte Ordnung der TAYLOR-Entwicklung in  $\Im(\alpha)$  zu verwenden und das Betragsquadrat des Eigenwertes  $\lambda_+$  bis zur ersten Ordnung von  $\Im(\alpha)$  zu entwickeln. Alle weiteren Terme in den jeweiligen Entwicklungen führen im Gesamtergebnis mindestens auf die erste Ordnung in  $\Im(\alpha)$  und können im Grenzfall  $\Re(\alpha) \gg \Im(\alpha)$  vernachlässigt werden. Die Entwicklung selbst ist algebraisch aufwendig, aber im Grunde anspruchslos, so daß man für das Betragsquadrat von  $\lambda_+$  nach entsprechender Rechnung

$$|\lambda_+|^2 = 1 - \frac{2\omega}{\sqrt{4 + 4\omega\alpha \cot[\omega a] - \omega^2\alpha^2}} \Im(\alpha) + \mathcal{O}\left\{\left[\Im(\alpha)\right]^2\right\}$$

erhält. Diese Entwicklung in den Vorfaktor von (6.48)

eingesetzt ergibt:

$$\begin{aligned} \frac{4\omega^3\Im(\alpha)}{1 - |\lambda_+|^2} |c_1|^2 &= \frac{\frac{\alpha}{a} + 2 + \omega\alpha \cot(\omega a)}{\sqrt{4 + 4\omega\alpha \cot[\omega a] - \omega^2\alpha^2}} \\ &= \frac{1}{ia} (\lambda_+)^{-1} \frac{\partial \lambda_+}{\partial \omega} \\ &= \frac{\partial k(\omega)}{\partial \omega}. \end{aligned} \quad (6.49)$$

Dabei ist in den beiden letzten Zeilen von der Darstellung (3.6) des Eigenwertes  $\lambda_+$  und der logarithmischen Ableitung Gebrauch gemacht worden. Für den Kommutator (6.48) ergibt sich daher im Grenzfall schwacher Absorption mit  $\Re(\alpha) \gg \Im(\alpha)$ :

$$\left[ \hat{\mathbf{a}}_\nu^{\pm 1}(\omega), (\hat{\mathbf{a}}_{\nu'}^{\pm 1})^\dagger(\omega') \right] = \frac{\partial k(\omega)}{\partial \omega} \delta_{\nu\nu'} \delta(\omega - \omega'). \quad (6.50)$$

Die Vertauschungsrelation (6.50) führt also direkt auf die Gruppengeschwindigkeit  $\partial_k \omega$  eines sich im Normalfall im Gitter ausbreitenden Wellenpaketes. Man beachte, daß die Näherung  $\Re(\alpha) \gg \Im(\alpha)$  in (6.50) auch auf die richtige Definition der Gruppengeschwindigkeit führt und diese, wenn man die Gültigkeit von (6.50) voraussetzen will, immer eine reelle Größe für ein reelles  $k$  und ein reelles  $\omega$  ist. Die bosonische Vertauschungsrelation (6.50) mit (6.49) für  $\alpha \rightarrow 0$  wird erfüllt, wenn man wieder das freie Strahlungsfeld im Vakuum betrachtet. Die Tatsache, daß man eine Gruppengeschwindigkeit von eins<sup>12</sup> fordern muß, stellt den indirekten Zusammenhang zu der Kausalitätsforderung der KRAMERS-KRONIG-Relationen her.

In der durch die Punktstreuer realisierten periodischen Struktur mit einem  $\alpha \neq 0$  wird die Gruppengeschwindigkeit immer von der Vakuumlichtgeschwindigkeit abweichen. In 5.1 wurde bereits festgestellt, daß die Bänder durch eine untere, von der Polarisierbarkeit unabhängige Bandkante und eine obere, von der Polarisierbarkeit abhängige Bandkante abgegrenzt werden. Vergleicht man die Bestimmungsgleichungen (5.7) und (5.8) dieser Bandkanten mit dem Inversen der Gruppengeschwindigkeit in (6.49), so wird deutlich, daß die Gruppengeschwindigkeit in Richtung der Bandkanten abnimmt, bis sie schließlich auf der Bandkante verschwindet. Dieses Ergebnis stimmt mit dem Resultat aus 3.2 überein, wonach die Bandstruktur auf der Bandkante extremal wird. Demnach stellt jede Umgebung in der Nähe der Bandkante immer eine natürliche Grenze dar. In der Bandlücke wird (6.49) mit (5.8) immer auf der imaginären Achse liegen. Nach dem BLOCH-Theorem sind nur reelle  $k(\omega)$  erlaubt, so daß mit dem Realteil von (6.49), wie zu erwarten war, auch die Gruppengeschwindigkeit in der Bandlücke verschwindet.

Die Erzeuger und Vernichter in (6.50) sind offensichtlich nur als Quasioperatoren zu verstehen. Da auch Moden in der Nähe der Bandkanten existieren, kann die

<sup>12</sup> Zur Vereinfachung wurde  $c = \mu_0 = \epsilon_0 = \hbar = 1$  gesetzt.

Vertauschungsrelation im  $k$ -Raum überprüft werden. Betrachtet man das Feld (6.8) in der Modenzerlegung und geht von den diskreten Moden auf das Modenkontinuum über, so muß für die entsprechenden Erzeuger und Vernichter der Moden

$$\left[ \hat{\mathbf{a}}_\nu(k), \hat{\mathbf{a}}_{\nu'}^\dagger(k') \right] = \delta_{\nu\nu'} \delta(k - k') \quad (6.51)$$

gelten, wenn man sich wieder nur auf das Gebiet der Einheitszelle neben dem Streuer bei  $x = \nu a$  beschränkt. Aus der Darstellung (6.8) des Strahlungsfeldes geht klar hervor, daß der Übergang in den Frequenzraum nur mit Hilfe der *Modendichte* erfolgen kann,

$$\hat{\mathbf{a}}_\nu^{+1}(\omega) = \frac{\partial k}{\partial \omega} \hat{\mathbf{a}}_\nu(k) . \quad (6.52)$$

Der Vergleich von (6.51) und (6.50) mit Hilfe von (6.52) führt auf:

$$\begin{aligned} \frac{\partial k}{\partial \omega} \delta(\omega - \omega') &= \left( \frac{\partial k}{\partial \omega} \right) \left( \frac{\partial k'}{\partial \omega'} \right) \delta(k - k') \\ &= \left( \frac{\partial k}{\partial \omega} \right)^2 \delta(k - k') , \end{aligned}$$

so daß für ein  $\omega = \omega(k)$  die bosonische Vertauschungsrelation erfüllt werden kann,

$$\left[ \frac{\partial \omega}{\partial k} \hat{\mathbf{a}}_\nu^{\pm 1}(\omega), \frac{\partial \omega'}{\partial k'} (\hat{\mathbf{a}}_{\nu'}^{\pm 1})^\dagger(\omega') \right] = \delta_{\nu\nu'} \delta(k - k') .$$

Sofern also eine entsprechende äquivalente Darstellung im Frequenzraum existiert, bleiben auch die Modenzerlegungen (6.40) und (6.41) in der Nähe der Bandkanten gültig. Dabei muß man beachten, daß die Operatoren (6.45) und (6.46) für ein  $\alpha \neq 0$  eine Näherung darstellen und nur im Fall des freien Strahlungsfeldes im Vakuum exakt sind.

### 6.4.3. Gleichzeitige, fundamentale Vertauschungsrelation

Die Felder werden kanonisch quantisiert. Mit (6.47) und (6.50) ergibt sich aus (6.40) und (6.41) mit den Modenfunktionen (6.42), (6.43) für die allgemeine Vertauschungsrelation zwischen den kanonisch konjugierten Größen des elektromagnetischen Feldes:

$$\left[ \hat{\mathbf{A}}_\nu(x), \hat{\mathbf{E}}_{\nu'}(x') \right] = -\frac{i}{2\pi} \delta_{\nu\nu'} \int_{\Delta\omega} d\omega \frac{\partial k(\omega)}{\partial \omega} \Re \left\{ A_\nu^+(x, \omega) [A_{\nu'}^+(x', \omega)]^* + A_\nu^-(x, \omega) [A_{\nu'}^-(x', \omega)]^* \right\} \quad (6.53)$$

$$= -\frac{i}{2\pi} \delta_{\nu\nu'} \int_{\Delta\omega} d\omega \frac{\partial k(\omega)}{\partial \omega} \underbrace{\left\{ \frac{2 + \omega\alpha \cot[\omega a]}{2 + \frac{\alpha}{a} + \omega\alpha \cot[\omega a]} \right\}}_{T_1} \left\{ e^{i\omega(x-x')} + e^{-i\omega(x-x')} \right\} \quad (6.54)$$

$$- \frac{i}{2\pi} \delta_{\nu\nu'} \int_{\Delta\omega} d\omega \frac{1}{2} \frac{\partial k(\omega)}{\partial \omega} \underbrace{\left\{ \frac{\omega\alpha - \omega\alpha \cot[\omega a]}{2 + \frac{\alpha}{a} + \omega\alpha \cot[\omega a]} \right\}}_{T_2} \left\{ e^{i\omega(x+x'-2\nu a)} + e^{-i\omega(x+x'-2\nu a-2a)} \right\} \quad (6.55)$$

$$+ \frac{i}{2\pi} \delta_{\nu\nu'} \int_{\Delta\omega} d\omega \frac{1}{2} \frac{\partial k(\omega)}{\partial \omega} \underbrace{\left\{ \frac{\omega\alpha + \omega\alpha \cot[\omega a]}{2 + \frac{\alpha}{a} + \omega\alpha \cot[\omega a]} \right\}}_{T_3} \left\{ e^{i\omega(x+x'-2\nu a-2a)} + e^{-i\omega(x+x'-2\nu a)} \right\} . \quad (6.56)$$

Damit  $\hat{\mathbf{A}}_\nu(x)$  und  $\hat{\mathbf{E}}_{\nu'}(x)$  die kanonisch konjugierten Größen bleiben, muß

$$\left[ \hat{\mathbf{A}}_\nu(x), \hat{\mathbf{E}}_{\nu'}(x') \right] = -i \delta_{\nu\nu'} \delta(x - x')$$

erfüllt werden. Der Kommutator in (6.53) zeigt noch einmal die Schwierigkeit auf, der man unterlegen sein kann, um die besagte Voraussetzung zu zeigen. Im Grunde genommen wäre dazu ein spezielles Modell für die ja im Normalfall frequenzabhängige Polarisierbarkeit erforder-

lich. Für die allgemeine Betrachtung ist daher eine Näherung erforderlich. Mit den Termen  $T_1, T_2, T_3$  in (6.54), (6.55) und (6.56) bietet es sich an für eine gegebene Periode  $a$

$$\omega\alpha \ll 1$$

zu fordern. Die Mittelfrequenz  $\omega_0$  befinde sich in einem Band mit der Bandnummer  $n$ ,

$$\omega_0 \in \left[ \omega_n(0), \omega_n\left(\frac{\pi}{a}\right) \right] , \quad n \in \mathbb{N} .$$

Wenn sich die Mittelfrequenz im Band  $n$  von den Bandkanten weit genug entfernt befindet,

$$\alpha\omega_n(0) = \frac{\alpha\pi}{a}(n-1) < \alpha\omega_0 < \alpha\omega_n\left(\frac{\pi}{a}\right), \quad (6.57)$$

kann die Gruppengeschwindigkeit nicht verschwinden und die Nullstellen der Kotangensfunktion in den Termen  $T_1$ ,  $T_2$  und  $T_3$  spielen keine wesentliche Rolle mehr, so daß man alle frequenzabhängigen Terme in (6.54), (6.55) und (6.56) bei entsprechend kleinen Frequenzintervallen  $\Delta\omega$  um  $\omega_0$  entwickeln kann und aus den jeweiligen Integralen ziehen darf. Mit  $\alpha\omega_0 \ll 1$  verschwinden die Terme  $T_2$ ,  $T_3$  in (6.55) und (6.56) und man erhält:

$$\begin{aligned} \left[ \hat{\mathbf{A}}_\nu(x), \hat{\mathbf{E}}_{\nu'}(x') \right]_{\alpha\omega_0 \ll 1} &= -i \frac{\partial k(\omega)}{\partial \omega} \Big|_{\alpha\omega_0 \ll 1} \left( 1 + \frac{\alpha}{2a} \right)^{-1} \\ &\quad \times \delta_{\nu\nu'} \delta_{\Delta\omega}(x-x') \\ &= -i \delta_{\nu\nu'} \delta_{\Delta\omega}(x-x'). \end{aligned} \quad (6.58)$$

Ähnlich wie in [GW96a] ist die  $\delta$ -Funktion  $\delta_{\Delta\omega}(x-x')$  dabei nur symbolisch zu verstehen und soll andeuten, daß  $\hat{\mathbf{A}}_\nu(x)$  und  $\hat{\mathbf{E}}_\nu(x)$  in dem gewählten, von der Polarisierbarkeit abhängigen Intervall  $\Delta\omega$  die kanonisch konjugierten Größen bleiben. Würde man für  $\alpha \rightarrow 0$  wieder alle Frequenzen  $\omega \in \mathbb{R}^+$  in (6.53) erlauben, bekäme man erneut die korrekte Vertauschungsrelation für das freie Strahlungsfeld und die symbolische  $\delta$ -Funktion würde in eine richtige  $\delta$ -Funktion übergehen. Für die erlaubten Bänder läßt sich mit  $\alpha\omega_0 \ll 1$  näherungsweise aus (6.57)

$$n \ll 1 + \frac{a}{\pi\alpha}, \quad n \in \mathbb{N}$$

abschätzen. In dieser Näherung muß die Polarisierbarkeit also schon sehr schwach gewählt werden, um die Modenerlegung auch für höhere Bänder zu erlauben.

Es sei noch erwähnt, daß man das Ergebnis (6.58) auch direkt mit der effektiven GREENS-Funktion (6.36) aus der bereits zuvor erwähnten Vertauschungsrelation (6.19) im Limes  $\Im(\alpha) \rightarrow 0$  hätte gewinnen können. Unabhängig davon, die Tatsache, daß mit den eingeführten Photonennoperatoren (6.45) und (6.46) sowie der Vertauschungsrelation (6.50) das elektromagnetische Feld und das entsprechende Potential mit (6.58) im betreffenden Intervall  $\Delta\omega$  als kanonisch konjugierte Variablen aufgefaßt werden können, zeigt, daß das Konzept der Modenerlegung in dem Quantisierungsschema auf der Basis der Rauschpolarisation enthalten ist.

## 7. SPONTANER ZERFALL

Die spontane Emission offener Quantensysteme hängt entscheidend von der Natur des Reservoir ab, mit welchem das System wechselwirkt. Durch die Änderung der Modendichte im Reservoir kann die spontane Emission maßgeblich beeinflusst werden. Atome den Bandlücken photonischer Materialien auszusetzen, in denen sich die Modendichte von der des freien Raums wesentlich unterscheidet, ist eine effektive Methode dies zu erreichen.

### 7.1. Das JAYNES-CUMMINGS-PAUL-Modell

Reduziert man das Atom auf ein Zwei-Niveau-System, ist die einfachste Form der Wechselwirkung des Atoms mit dem Reservoir durch das JAYNES-CUMMINGS-PAUL-Modell [WM94] gegeben,

$$\hat{\mathbf{H}}_{\text{JCP}} = \omega_{eg} \hat{\sigma}_z + \sum_m \int_0^\infty d\omega \omega \hat{\mathbf{f}}_m^\dagger(\omega) \hat{\mathbf{f}}_m(\omega) + \sum_m \int_0^\infty d\omega g_m(\omega) \left[ \hat{\sigma}^+ \hat{\mathbf{f}}_m(\omega) + \hat{\sigma}^- \hat{\mathbf{f}}_m^\dagger(\omega) \right],$$

in dem das Atom an ein Reservoir aus bosonischen Oszillatoren gekoppelt wird. Befindet sich das Atom in einer periodischen Anordnung aus Punktstreuern, beschreibt das Kontinuum aus den bosonischen Feldern  $\hat{\mathbf{f}}_m(\omega)$  das Reservoir, wobei die Energie der Gesamtanregungen mit (2.42) gegeben wird. Die PAULI-Spin-Operatoren übernehmen hierbei die Aufgabe der *Flipoperatoren* zwischen dem angeregten Zustand und dem Grundzustand des Zwei-Niveau-Systems und finden hier ausschließlich wegen ihrer *Algebra* eine Anwendung.

Für den Zerfall eines angeregten Zustandes spielt die Kopplung  $g_m$  des Strahlungsfeldes an das Atom eine entscheidende Rolle. In der Feldtheorie kann man sowohl in *minimaler* als auch in *Multipolkopplung*<sup>13</sup> mit Hilfe der elektrischen Dipolnäherung [CTDRG89], [WM94] das

<sup>13</sup> Man findet in der Literatur oft widersprüchliche Angaben zum richtigen Wechselwirkungsterm in der Dipolnäherung. Verwendet man die Multipolkopplung, so koppelt in der Dipolnäherung das Dipolmoment an den transversalen Anteil der elektrischen Verschiebung an, wobei hingegen mit minimaler Kopplung die Dipolnäherung auf eine Kopplung des Dipolmoments an den transversalen Anteil des elektrischen Feldes führt. Wird der HAMILTON-Operator der minimalen Kopplung unitär transformiert und der resultierende HAMILTON-Operator der Multipolkopplung in Verbindung mit den umtransformierten Feldern und Zuständen verwendet, liefern minimale Kopplung und Multipolkopplung unterschiedliche Ergebnisse, wenn die unterschiedliche physikalische Bedeutung der kanonischen Feldimpulse nicht beachtet wird. Im Gegensatz zur minimalen Kopplung unterscheiden sich in der Multipolkopplung auch kinetischer und kanonischer Feldimpuls. (siehe POWER-ZIENAU-Transformation [CTDRG89])

Atom durch das Dipolmoment  $\hat{\mathbf{d}}$  direkt an das elektrische Strahlungsfeld koppeln:

$$\hat{\mathbf{d}} = d |g\rangle\langle e| + d^* |e\rangle\langle g|,$$

dabei sind  $|g\rangle\langle e|$  und  $|e\rangle\langle g|$  die atomaren Flipoperatoren zwischen dem angeregten Zustand und dem Grundzustand des Atoms und  $d$  das entsprechende Matrixelement des Dipoloperators.

Befindet sich das Atom im angeregten Zustand und setzt man Resonanzübergänge voraus, so muß zunächst unabhängig vom JAYNES-CUMMINGS-PAUL-Modell für den HAMILTON-Operator in der Dipolnäherung gelten<sup>14</sup>:

$$\hat{\mathbf{H}} = \omega_{eg} |e\rangle\langle e| + \sum_m \int_0^\infty d\omega \omega \hat{\mathbf{f}}_m^\dagger(\omega) \hat{\mathbf{f}}_m(\omega) - \hat{\mathbf{d}} \hat{\mathbf{E}}(x), \quad (7.1)$$

wobei mit  $\omega_{eg}$  die Übergangsfrequenz vom angeregten Zustand in den Grundzustand berücksichtigt wird. Im SCHRÖDINGER-Bild liegt die Zeitentwicklung bei den Zuständen. Die Operatoren

$$|e\rangle\langle g| \hat{\mathbf{f}}_m^\dagger(\omega), \quad |g\rangle\langle e| \hat{\mathbf{f}}_m(\omega)$$

in der Wechselwirkung führen zu schnell oszillierenden Termen, die die Resonanzbedingung verletzen und deshalb vernachlässigt werden müssen. Diese *Drehwellen-näherung*<sup>15</sup> [WM94], [Sch01] kann aber auch schon aus energetischen Gesichtspunkten vollzogen werden, da die Anregung des Atoms bei Erzeugung eines Polaritons bzw. der Übergang des Atoms in den Grundzustand bei gleichzeitiger Vernichtung des Polaritons die Energieerhaltung verletzt. Berücksichtigt man die Drehwellen-näherung, so ergibt sich mit (6.16) für den Wechselwirkungsterm im SCHRÖDINGER-Bild:

$$-\hat{\mathbf{d}} \hat{\mathbf{E}}(x) = -i \int_0^\infty d\omega \sqrt{\frac{\Im[\alpha(\omega)]}{\pi}} \omega^2 \times \sum_m G_{\text{eff}}(x, m, \omega) d^* |e\rangle\langle g| \hat{\mathbf{f}}_m(\omega) + \text{h. c. .}$$

Der HAMILTON-Operator (7.1) kann so wieder auf das JAYNES-CUMMINGS-PAUL-Modell zurückgeführt werden, wobei die Stärke  $g_m$  der Kopplung weitestgehend durch die effektive GREENS-Funktion bestimmt wird,

$$g_m(\omega, x) = -id^* \sqrt{\frac{\Im[\alpha(\omega)]}{\pi}} \omega^2 G_{\text{eff}}(x, m, \omega).$$

Wenn sich das Atom zum Zeitpunkt  $t = 0$  im angeregten Zustand befindet, befindet sich das Feld im Vakuumgrundzustand ( $T = 0$ ),

$$|\psi(0)\rangle = |\psi_{\text{Feld}}\rangle \otimes |\psi_{\text{Atom}}\rangle = |e, 0\rangle.$$

<sup>14</sup> Man beachte im Unterschied dazu die Wirkung der PAULI-Spin-Operatoren auf die einzelnen Zustände des Atoms.

<sup>15</sup> Auf Grund der englischen Abkürzung RWA von einigen auch scherzhaft als **Real World Approximation** bezeichnet.

Stimulierte Emission kann daher ausgeschlossen werden, der spontane Zerfall des angeregten Zustandes des Atoms ist das, was übrigbleibt. Wenn man nur resonante Übergänge zuläßt, kann man den Zustand zum Zeitpunkt  $t$  mit

$$|\psi(t)\rangle = c_e(t) e^{-i\omega_{eg}t} |e, 0\rangle + \sum_m \int_0^\infty d\omega c_{gm}(\omega, t) e^{-i\omega t} |g, 1_{\omega m}\rangle$$

ansetzen und die Entwicklungskoeffizienten mit Hilfe der SCHRÖDINGER-Gleichung,

$$\partial_t |\psi(t)\rangle = -i\hat{\mathbf{H}} |\psi(t)\rangle ,$$

bestimmen. Mit  $|g, 1_{\omega m}\rangle$  soll dabei nach dem Übergang des Atoms in den Grundzustand eine Anregung entsprechender Frequenz am Ort  $ma$  des Gitters gekennzeichnet werden. Der Produktraum liegt einem entsprechenden Basissystem zugrunde,

$$\begin{aligned} \langle g, 1_{\omega m} | e, 0 \rangle &= 0 , \\ \langle g, 1_{\omega' m'} | g, 1_{\omega m} \rangle &= \delta_{mm'} \delta(\omega - \omega') . \end{aligned}$$

Mit der Wirkung der einzelnen Erzeuger und Vernichter auf die jeweiligen Produktzustände ergibt sich mit  $\hat{\mathbf{H}}$  aus (7.1) für die Wahrscheinlichkeitsamplituden  $c_e(t)$  und  $c_{gm}(\omega, t)$  nach Substitution von  $|\psi(t)\rangle$  in die SCHRÖDINGER-Gleichung ein gekoppeltes Differentialgleichungssystem,

$$\begin{aligned} \dot{c}_e(t) &= - \int_0^\infty d\omega \sqrt{\frac{\Im(\alpha)}{\pi}} \omega^2 d^* \\ &\quad \times \sum_m G_{\text{eff}}(x, ma, \omega) c_{gm}(\omega, t) e^{it(\omega_{eg} - \omega)} , \end{aligned}$$

$$\dot{c}_{gm}(\omega, t) = \sqrt{\frac{\Im(\alpha)}{\pi}} \omega^2 d G_{\text{eff}}^*(x, ma, \omega) c_e(t) e^{it(\omega - \omega_{eg})} . \quad (7.2)$$

Integration und Iteration führt dann für die Wahrscheinlichkeitsamplitude  $c_e(t)$  des angeregten Zustandes auf eine Integro-Differentialgleichung mit einem entsprechenden Integralkern  $K(t-t')$  einer Faltung,

$$\begin{aligned} \dot{c}_e(t) &= - \int_0^t dt' K(t-t') c_e(t') e^{i\omega_{eg}(t-t')} \\ &= - \int_0^t dt' \left\{ \int_0^\infty d\omega \frac{\Im[\alpha(\omega)]}{\pi} \omega^4 |d|^2 \right. \\ &\quad \left. \times \sum_m |G_{\text{eff}}(x, ma, \omega)|^2 e^{i(t-t')\omega} \right\} c_e(t') e^{i\omega_{eg}(t-t')} \\ &= - |d|^2 \int_0^t dt' \int_0^\infty d\omega \left\{ \omega \mathcal{J}(x, \omega) e^{i(t-t')\omega} \right\} \\ &\quad \times c_e(t) e^{i\omega_{eg}(t-t')} . \quad (7.3) \end{aligned}$$

In der letzten Zeile ist der Integralkern in seine frequenzabhängigen Anteile zerlegt worden und dabei die lokale Zustandsdichte  $\mathcal{J}(x, \omega)$  mit

$$\mathcal{J}(x, \omega) = \frac{\Im[\alpha(\omega)] \omega^3}{\pi} \sum_m |G_{\text{eff}}(x, ma, \omega)|^2 \quad (7.4)$$

eingeführt worden. Die lokale Zustandsdichte oder LDOS [MBM<sup>+</sup>04], [Mor99] kann man in unterschiedlicher Weise interpretieren. Zum einen zählt sie natürlich die Moden des elektromagnetischen Feldes, in die die Photonen am Ort des Atoms emittiert werden können. Die im hier verwendeten Fall kombinierter elektromagnetischer Felder und Polarisationsfelder übertragene Bedeutung liegt aber in der Energiedichte der propagierenden Felder, mit der man die Dichte der Vakuumfluktuationen direkt messen kann [MBM<sup>+</sup>04]. Um die lokale Zustandsdichte zu betrachten, setze man den Beobachter in der effektiven GREENS-Funktion wieder in eine Einheitszelle, vorzugsweise in die Zelle neben dem Streuer bei  $x=0$  mit  $x \in [0, a]$ . Behält man die Konvention von 6.3 bei, so ergibt sich für die LDOS aus (6.36):

$$\begin{aligned} \mathcal{J} &= \frac{\Im[\alpha(\omega)] \omega^3}{\pi} \sum_{m=-\infty}^0 |\lambda_+|^{-2m} |A_0(x, \omega)|^2 \\ &\quad + \sum_{m=1}^\infty |\lambda_+|^{2(m-1)} |A_0(a-x, \omega)|^2 \\ &= \frac{\Im[\alpha(\omega)] \omega^3}{\pi (1 - |\lambda_+|^2)} \left[ |A_0(x, \omega)|^2 + |A_0(a-x, \omega)|^2 \right] , \end{aligned} \quad (7.5)$$

wenn man von der geometrischen Reihe Gebrauch macht.

## 7.2. FERMIs Goldene Regel

Die LDOS ist dabei eine Anlehnung an FERMIs Goldene Regel [CTDRG92], [CTDRG89]. Diese würde man auch direkt aus (7.2) erhalten, wenn man annimmt, daß die Verweilwahrscheinlichkeit im angeregten Zustand viel größer sein soll als die Übergangswahrscheinlichkeit in den Grundzustand,  $c_e(t) = c_e(0) = 1$ . Integriert man (7.2) mit  $c_e(t) = c_e(0) = 1$  im Intervall  $[0, t]$  und verwendet [BS87]

$$e^{ix} - 1 = 2ie^{ix/2} \sin\left(\frac{x}{2}\right) ,$$

so erhält man für die Population des angeregten Zustandes nach der Zeit  $t$ :

$$\begin{aligned} |c_e(t)|^2 &= 1 - \sum_m \int_0^\infty d\omega |c_{gm}(\omega, t)|^2 \\ &= 1 - \int_0^\infty d\omega |d|^2 \omega \mathcal{J}(x, \omega) \\ &\quad \times \frac{\sin^2[(\omega - \omega_{eg})t/2]}{(\omega - \omega_{eg})^2/4} . \end{aligned}$$



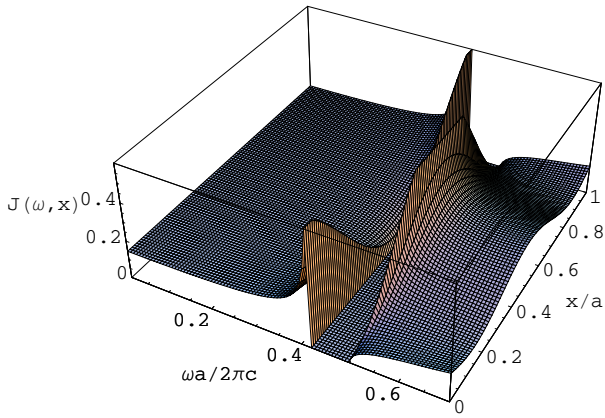


Abbildung 12: Lokale Zustandsdichte (7.5) in einer Einheitszelle eines  $\infty$ -periodischen, eindimensionalen Kristalls aus Punktstreuern mit einer Polarisierbarkeit  $\alpha=0.2a + i0a$  im Intervall  $0 < \omega a/2\pi c < 0.7$ . Deutlich ist die Bandlücke zu erkennen, die das erste Frequenzband vom zweiten Band abtrennt. Aufgrund verschwindender Absorption ist dies der Grenzfall, der durch Blochmoden beschrieben wird. Das Quantisierungsschema auf der Basis der Rauschpolarisation umfaßt also auch den Fall der Modenzerlegung.

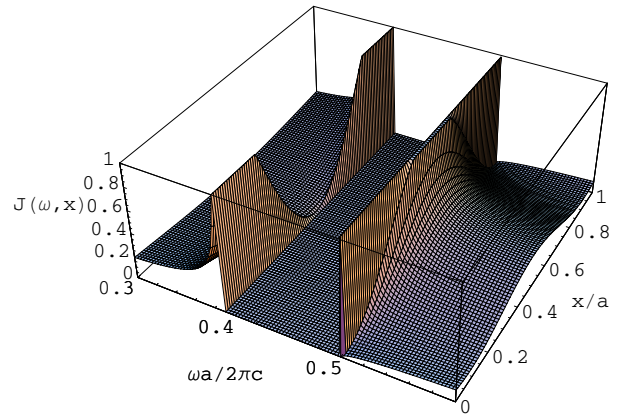


Abbildung 13: Wie Abb.12, jedoch mit einer Polarisierbarkeit  $\alpha=0.3a + i0a$  in dem vorgeschriebenen Frequenzintervall  $0.3 < \omega a/2\pi c < 0.7$ . Die deutlich erkennbare Bandlücke wird in Übereinstimmung mit 5.1 größer, wenn die Dispersion zunimmt. Allgemein wird bei verschwindender Absorption die LDOS zusammen mit der Bandstruktur auf der Bandkante extremal bzw. divergiert.

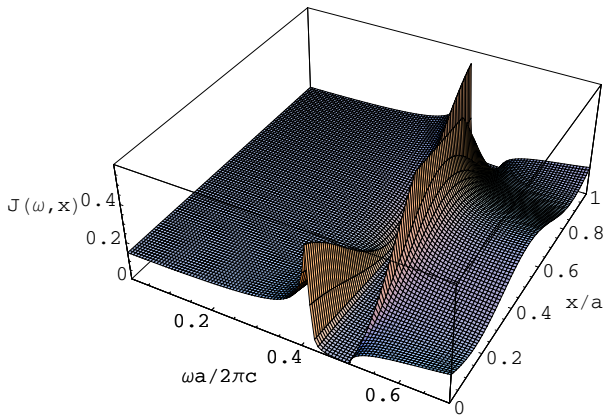


Abbildung 14: LDOS nach (7.5) für das  $\infty$ -periodische Punktstreuermodell bei einer festen Polarisierbarkeit  $\alpha=0.2a + i0.01a$ . Solange man kein spezielles Modell für die Polarisierbarkeit verwendet, das die KRAMERS-KRONIG-Relationen erfüllt, muß man sich mit dem Fall schwacher Absorption begnügen, der in kleinen Frequenzintervallen seine Gültigkeit behält.

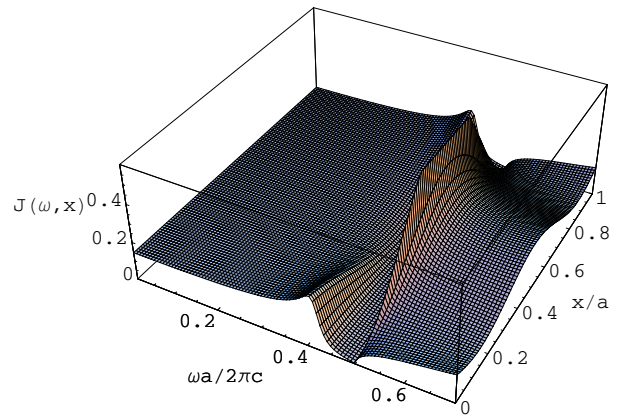


Abbildung 15: Wie Abb.14, jedoch mit größerer Absorption  $\alpha=0.2a + i0.05a$ . Im unteren Frequenzbereich verhält sich das Gitter fast wie ein homogenes Medium. Erst wenn man sich der Bandkante nähert, treten die Einflüsse hervor, die das Gitter auf die Vakuumfluktuationen hat. Nimmt die Absorption zu, nimmt die Schärfe der Bandkanten immer mehr ab.

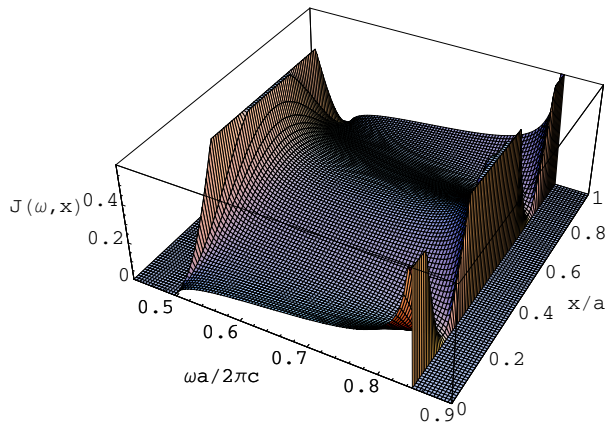


Abbildung 16: Lokale Zustandsdichte (7.5) in einer Einheitszelle eines  $\infty$ -periodischen, eindimensionalen Kristalls aus Punktstreuern mit einer Polarisierbarkeit  $\alpha=0.2a + i0a$  im Intervall  $0.43 < \omega a/2\pi c < 0.9$ . In diesem Frequenzintervall wird eindeutig das zweite Band der photonischen Bandstruktur erfasst. Neben dem typischen divergierenden Verhalten auf der Bandkante verhält sich das Gitter jetzt im Gegensatz zum ersten Band im entsprechendem Abstand zu den Bandkanten nicht mehr wie ein homogenes Medium, es treten lokale Minima und Maxima in der Einheitszelle in Erscheinung.

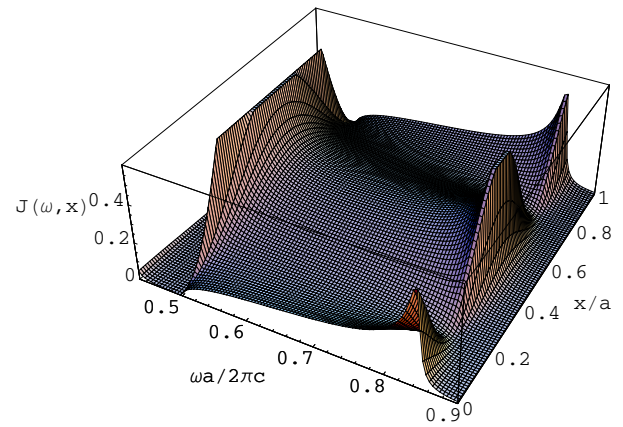


Abbildung 17: Wie Abb.16, jedoch mit einer Polarisierbarkeit  $\alpha=0.2a + i0.01a$ . Mit dem Auftauchen der lokalen Extrema wird der spontane Zerfall nicht nur in der Nähe der Bandkanten begünstigt, sondern kann auch innerhalb der Bänder an verschiedenen Orten innerhalb der Einheitszelle unterschiedlich stark beschleunigt werden.

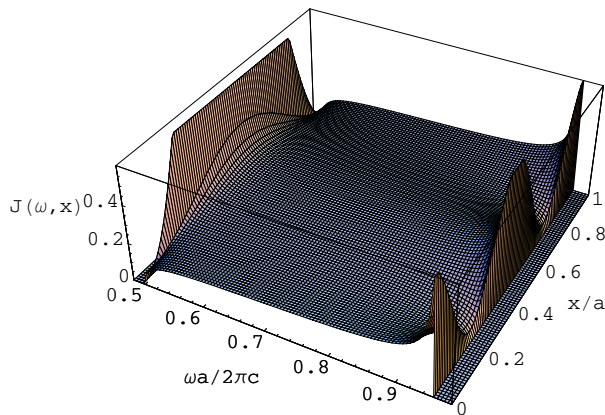


Abbildung 18: LDOS nach (7.5) für das  $\infty$ -periodische Punktstreuervermodell bei einer festen Polarisierbarkeit  $\alpha=0.05a + i0a$  im Intervall  $0.48 < \omega a/2\pi c < 0.98$ . Verkleinert man die Polarisierbarkeit bzw. die Dispersion, so werden die Bandlücken immer schmaler, die lokalen Minima und Maxima in der Einheitszelle verschwinden. Im Grenzfall verschwinden die Bandlücken ebenfalls und man erhält wieder das freie Strahlungsfeld.

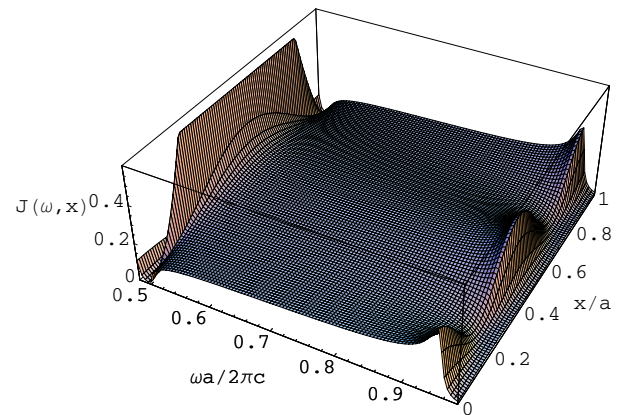


Abbildung 19: Wie Abb.18, jedoch mit schwacher Absorption  $\alpha=0.1a + i0.007a$ .

Die Übergangswahrscheinlichkeit ist wegen des Verlaufs der Funktion

$$\frac{\sin^2 [(\omega - \omega_{eg})t/2]}{(\omega - \omega_{eg})^2/4} \quad (7.6)$$

nur dann wesentlich von null verschieden, wenn die Resonanzbedingung

$$|\omega - \omega_{eg}| < \frac{2\pi}{t} \quad (7.7)$$

erfüllt wird. Die Funktion (7.6) ist eine Funktionenfolge, die im distributionellen Limes wieder auf die  $\delta$ -Distribution führt<sup>16</sup>,

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \frac{\sin^2 [(\omega - \omega_{eg})t/2]}{(\omega - \omega_{eg})^2/4} = 2\pi t \delta(\omega - \omega_{eg})$$

und man erhält für große Zeiten  $t$  die Zerfallsrate bzw. Übergangswahrscheinlichkeit pro Zeiteinheit:

$$\begin{aligned} \gamma_{e \rightarrow g} &= 2\pi |d|^2 \omega_{eg} \mathcal{J}(x, \omega_{eg}) \quad (7.8) \\ &= 2\pi \sum_m \int_0^\infty d\omega \left| \langle g, 1_{\omega m} | \hat{\mathbf{d}} \hat{\mathbf{E}}(x) | e, 0 \rangle \right|^2 \\ &\quad \times \delta(\omega - \omega_{eg}), \end{aligned}$$

was mit FERMIs Goldener Regel übereinstimmt. In FERMIs Goldener Regel ist die Zerfallsrate der LDOS proportional und damit direkt dem Einfluß erlegen, den das Hintergrundmedium auf den spontanen Zerfall des Atoms am Ort  $x=x_A$  hat. In den Bandlücken verschwindet die Zustandsdichte, spontaner Zerfall wird damit vollständig unterbunden. Dies ist im Prinzip das Ergebnis zeitabhängiger Störungstheorie erster Ordnung, mit (7.7) aber nur für Zeiten gültig, die wegen der vorausgesetzten hohen Verweilwahrscheinlichkeit wesentlich kleiner als die Lebensdauer des angeregten Zustandes selbst sind. In diesem Sinn ist die Goldene Regel immer als eine Näherung zu betrachten.

Wenn die Korrelationen der Atom-Feld-Zustände immer schneller zerfallen als die Zustände selbst, kann man in (7.3) auf die MARKOV-Näherung zurückgreifen. Diese Voraussetzung ist natürlich stark von der Kopplung an das Reservoir abhängig. Wenn man in (7.3) den Integralkern im FOURIER-Raum auf Frequenzen  $\omega \rightarrow \omega_{eg}$

<sup>16</sup> Dazu muß man lediglich nachprüfen, daß mit

$$y(x, \varepsilon) = \frac{1}{\pi \varepsilon} \left( \frac{\sin(x/\varepsilon)}{x/\varepsilon} \right)^2$$

$$\int_{\mathbb{R}} dx y(x, \varepsilon) = 1$$

und

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \int_{\mathbb{R}} dx f(x) y(x, \varepsilon) = f(0)$$

erfüllt werden.

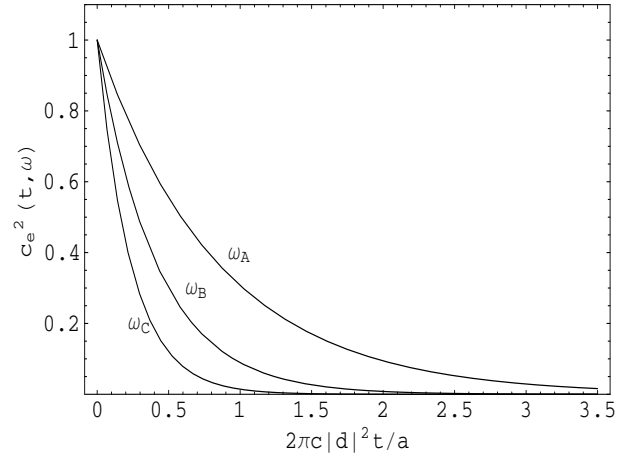


Abbildung 20: Exponentieller Zerfall des angeregten Zustandes eines Zwei-Niveau-Atoms in einer Einheitszelle der  $\infty$ -periodischen Anordnung durch  $\delta$ -Streuer bei  $T=0K$  am Ort  $x=0.4a$ . Dargestellt ist die Population mit der Zerfallsrate (7.8) und der LDOS (7.4) für die Übergangsfrequenzen  $\omega_A=0.2 \cdot 2\pi c/a$ ,  $\omega_B=0.6 \cdot 2\pi c/a$  und  $\omega_C=0.4 \cdot 2\pi c/a$  bei einer Dispersion  $\alpha=0.2a$ . In der Nähe der Bandkante des ersten Bandes nimmt die Zerfallsrate mit  $\omega_C$  stark zu. Bewegt man sich mit  $\omega_B$  von der zweiten Bandkante weiter weg, nimmt die Zerfallsrate wieder ab. Das Atom selbst ist dabei ein sehr sanftmütiges Atom, da es so bescheiden ist und sich auf die Vorzüge einer eindimensionalen Welt beschränkt.

fixiert, vereinfacht sich der Integralkern auf eine einfache  $\delta$ -Funktion,

$$K(t-t') = 2\pi \omega_{eg} \mathcal{J}(x, \omega_{eg}) \delta(t-t')$$

und das verbleibende Zeitintegral bricht zusammen, so daß für  $c_e(t)$  folgt<sup>17</sup>:

$$\dot{c}_e(t) = -\frac{\gamma_{e \rightarrow g}}{2} c_e(t)$$

und sich damit für den Zustandsvektor

$$\begin{aligned} |\psi(t)\rangle &= e^{-i\omega_{eg}t - \gamma_{e \rightarrow g}t/2} |e, 0\rangle \\ &+ id \sum_m \int_0^\infty d\omega \sqrt{\frac{\Im[\alpha(\omega)]}{\pi}} \omega^2 G_{\text{eff}}^*(x, m, a, \omega) \\ &\times \frac{1 - \exp[it(\omega - \omega_{eg} + i\gamma_{e \rightarrow g}/2)]}{\omega - \omega_{eg} + i\gamma_{e \rightarrow g}/2} e^{-i\omega t} |g, 1_{\omega m}\rangle \end{aligned}$$

ergibt. In der MARKOV-Näherung wird also der *Gedächtniskern* praktisch gelöscht und der angeregte Zustand zerfällt exponentiell mit einer Rate  $\gamma_{e \rightarrow g}$  in den Grundzustand. Dies ist das Ergebnis der WIGNER-WEISSKOPF-Theorie [WW30] mit dem typischen LORENTZ-Profil des

<sup>17</sup> Die  $\delta$ -Funktion in der MARKOV-Näherung von  $K(t-t')$  ist aufgrund des eingeschränkten Zeitintervalls in (7.3) auf ein Halbnormiert.

Emissionspektrums beim Übergang in den Grundzustand und bleibt im Gegensatz zu FERMIs Goldener Regel auch für größere Zeiten gültig. Unabhängig in welcher Näherung man den Zerfall des angeregten Zustandes betrachtet, die lokale Zustandsdichte bleibt immer ein Maß für die Stärke des Zerfalls und ist daher ein wichtiges Mittel, um die Eigenschaften periodischer Medien zu untersuchen, da sie durch die GREENS-Funktion alle relevanten Materieparameter enthält, die die Entwicklung eines Atoms in der Struktur beeinflussen können.

### 7.2.1. Zur Vakuumzerfallsrate

Die Zerfallsrate in (7.8) bleibt so auch im dreidimensionalen Raum gültig. Die Vakuumzerfallsrate für den freien Raum ist dabei durch den EINSTEIN-Koeffizienten

$$\gamma_0 = \frac{\omega^3 d^2}{3\pi}$$

gegeben. Diesen liefert im Normalfall ebenfalls FERMIs Goldene Regel, wenn man die Modendichte des freien Raums verwendet. Die LDOS (7.4) wird im wesentlichen durch die effektive GREENS-Funktion (6.33) bestimmt, im Limes  $\Im(\alpha) \rightarrow 0$  muß man wieder die Zerfallsrate des freien Raumes erhalten. Dazu muß man beachten: Obwohl man hier linear polarisierte Strahlung untersuchen will, die Strahlungsquelle, die zur Konstruktion der GREENS-Funktion (6.33) verwendet wurde, *lebt* in einer eindimensionalen Welt. In diesem Fall unterscheidet sich die Modendichte von der im dreidimensionalen Fall und man erhält so ein anderes Ergebnis für  $\gamma_0$ . Die Zwei-Niveau-Atome, die eine Zerfallsrate (7.8) mit der LDOS (7.4) besitzen, sollen daher linear polarisierte Strahlung emittieren und deren Freiheitsgrade bezüglich der Ausstrahlungsrichtung auf einen Einzigsten festgelegt werden.

Wenn der Beobachter des Strahlungsfeldes (6.16) wieder auf das Gebiet in der Einheitszelle neben dem Streuer bei  $x=\nu a$  beschränkt bleibt, kann man wieder auf die effektive GREENS-Funktion (6.36) zurückgreifen. In der LDOS (7.4) kann man dann so wieder unweigerlich von der geometrischen Reihe Gebrauch machen. Wenn man den Grenzübergang  $\alpha \rightarrow 0$  für die Amplituden in der GREENS-Funktion vollzieht, verschwindet mit (6.38) die Ortsabhängigkeit und für die Zerfallsrate eines Zwei-Niveau-Atoms ergibt sich zu:

$$\begin{aligned} \gamma_{e \rightarrow g} &\stackrel{\alpha \rightarrow 0}{\equiv} 2\pi |d|^2 \frac{\Im(\alpha)\omega}{1 - |\lambda_+|^2} \frac{\omega^3}{2\pi\omega^2} \\ &\stackrel{\alpha \rightarrow 0}{\equiv} |d|^2 \omega. \end{aligned}$$

Dabei ist in der ersten Zeile der Eigenwert  $\lambda_+$  wieder in  $\alpha$  entwickelt worden, was im Limes zu dem letzteren Ergebnis führt.

Diese Zerfallsrate hätte man auch direkt mit dem freien Strahlungsfeld (6.39), das die unterschiedliche Ausstrahlungsrichtung mit berücksichtigt, aus FERMIs Goldener

Regel gewinnen können. In der hier betrachteten eindimensionalen *Welt* steigt die Zerfallsrate im eindimensionalen, freien Raum daher linear mit der Übergangsfrequenz  $\omega$  des Atoms an.

### 7.3. Die lokale Zustandsdichtefunktion

Will man über das JAYNES-CUMMINGS-PAUL-Modell hinaus das offene Quantensystem eines Zwei-Niveau-Atoms an ein *thermisches* Bad aus Bosonen koppeln, so muß man in Übereinstimmung mit WEISSKOPF und WIGNER auf die *Quantenmastergleichung* zurückgreifen. Aus der durch die Mastergleichung beschriebenen Dichtematrix  $\hat{\rho}$  gehen dann durch ihre Diagonalelemente die Ratengleichungen für die Populationen des angeregten Zustands und des Grundzustands hervor,

$$\begin{aligned} \dot{\rho}_{ee} &= -\gamma_{e \rightarrow g} \rho_{ee} + \gamma_{g \rightarrow e} \rho_{gg} \\ \dot{\rho}_{gg} &= -\gamma_{g \rightarrow e} \rho_{gg} + \gamma_{e \rightarrow g} \rho_{ee}. \end{aligned}$$

Weil das Feld jetzt ein thermisches Feld ist, beschreibt die Zerfallsrate  $\gamma_{e \rightarrow g}$  neben der spontanen auch die stimulierte Emission. Bei  $T = 0$  befindet man sich wieder im Vakuumgrundzustand und die Ratengleichungen führen wieder auf das Ergebnis des exponentiellen Zerfalls des angeregten Zustandes ( $\gamma_{g \rightarrow e} = 0$ ).

#### 7.3.1. Zur Feldkorrelationsfunktion

Behält man die Dipolnäherung in der Wechselwirkung bei und wendet die MARKOV-Näherung an, so erhält man für die Zerfallsrate mit Hilfe des Dichtematrixformalismus [CTDRG92]:

$$\gamma_{e \rightarrow g} = |\vec{d}|^2 \mathcal{S}(-\omega),$$

wobei mit

$$\mathcal{S}(-\omega) = \int d\tau e^{i\omega\tau} \left\langle \hat{E}_i(\vec{r}, t + \tau) \hat{E}_j(\vec{r}, t) \right\rangle$$

das Feldspektrum eingeführt wird. Das Feldspektrum wird direkt durch die Feldkorrelationsfunktion bestimmt. Für statistisch stationäre Prozesse ist diese nur von den Zeitdifferenzen abhängig,

$$\mathcal{S}(-\omega) = \int d\tau e^{i\omega\tau} \left\langle \hat{\mathbf{E}}(x, \tau) \hat{\mathbf{E}}(x, 0) \right\rangle$$

und man erhält mit (7.8) für die lokale Zustandsdichte:

$$\mathcal{J}(x, \omega) = \frac{1}{2\pi\omega} \int d\tau e^{i\omega\tau} \left\langle \hat{\mathbf{E}}(x, \tau) \hat{\mathbf{E}}(x, 0) \right\rangle. \quad (7.9)$$

Dieser Ausdruck ist wesentlich allgemeiner, da er die LDOS direkt mit den Feldfluktuationen in Zusammenhang bringen kann. Die Mittelung in (7.9) erfolgt dabei

über die Spur zusammen mit der Dichtematrix als statistischen Operator. Im HEISENBERG-Bild bleiben die Felder  $\hat{\mathbf{f}}_m(\omega, t)$  harmonisch,

$$\hat{\mathbf{f}}_m(\omega, t) = \hat{\mathbf{f}}_m(\omega) e^{-i\omega t} .$$

Im Vakuumgrundzustand kann man den Erwartungswert zusammen mit (6.16) wieder aus *reinen* Zuständen bilden und man erhält für die Feldkorrelationsfunktion:

$$\begin{aligned} \langle \hat{\mathbf{E}}(x, \tau) \hat{\mathbf{E}}(x, 0) \rangle_{\text{Vac}} &= \frac{1}{\pi} \int_0^\infty d\omega' \Im[\alpha(\omega')] (\omega')^4 \\ &\quad \times \sum_m |G_{\text{eff}}(x, m a, \omega')|^2 e^{-i\omega' \tau} \\ &\stackrel{\text{(C5)}}{=} \frac{1}{\pi} \int_0^\infty d\omega' (\omega')^2 \\ &\quad \times \Im[G(x, x, \omega')] e^{-i\omega' \tau} . \end{aligned}$$

Dabei hat die Vertauschungsrelation (6.15) ihre Anwendung gefunden und die Tatsache, daß für Bosonen die entsprechenden Erwartungswerte

$$\begin{aligned} \langle \hat{\mathbf{f}}_{m'}^\dagger(\omega'') \hat{\mathbf{f}}_m(\omega') \rangle_{\text{Vac}} &= 0 , \\ \langle \hat{\mathbf{f}}_{m'}(\omega'') \hat{\mathbf{f}}_m(\omega') \rangle_{\text{Vac}} &= 0 , \\ \langle \hat{\mathbf{f}}_{m'}^\dagger(\omega'') \hat{\mathbf{f}}_m^\dagger(\omega') \rangle_{\text{Vac}} &= 0 \end{aligned}$$

verschwinden. Das verbleibende Zeitintegral führt auf eine  $\delta$ -Funktion in der Frequenz und man erhält wieder die lokale Zustandsdichte:

$$\begin{aligned} \mathcal{J}(x, \omega) &= \frac{\Im[\alpha(\omega)] \omega^3}{\pi} \sum_m |G_{\text{eff}}(x, m a, \omega')|^2 \\ &= \frac{\omega}{\pi} \Im[G(x, x, \omega')] . \end{aligned} \quad (7.10)$$

In der zweiten Zeile wurde dabei immer jeweils von (C5) Gebrauch gemacht. Damit ist der Zusammenhang zum Dissipations-Fluktuations-Theorem hergestellt (siehe C).

Man kann die LDOS also auch direkt *messen*, indem man einen Beobachter auf eine Punktquelle setzt und diese dann zusammen bei Anwesenheit des Hintergrundmediums durch den Raum verschiebt. In der Näherung durch unendlich ausgedehnte, periodische Strukturen reicht es aus sich auf das Gebiet einer Einheitszelle zu beschränken, da die lokale Zustandsdichte ebenfalls dieselbe Periodizität aufweisen muß. Man setzt also eine Punktquelle in das Vakuum einer Einheitszelle, der linke und rechte Halbraum im Abstand  $d_L$  und  $d_R$  relativ zur Quelle wird dann wieder durch zwei unendlich ausgedehnte Kristalle beschrieben.

Das abgestrahlte Feld der Punktquelle kann man wieder durch die Lösung (2.53) der Differentialgleichung (2.47) gewinnen. Berücksichtigt man zusätzlich die von

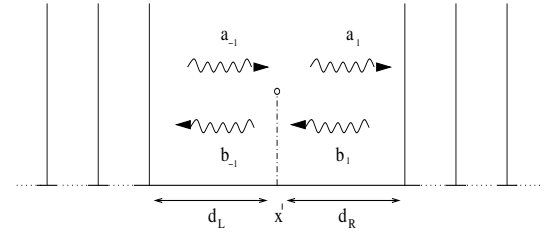


Abbildung 21: Prinzipskizze zur Bestimmung der GREENS-Funktion mit Hilfe einer Punktquelle in einer Einheitszelle. Die von der Punktquelle abgestrahlten Amplituden werden von den beiden im Abstand  $d_L$  und  $d_R$  zur Quelle platzierten Kristalle reflektiert. Der Beobachter nimmt daher diese in Abhängigkeit von der Position zur Quelle unterschiedlich wahr.

den Kristallen des linken und rechten Halbraums reflektierten Anteile durch die homogene Lösung von (2.47), so kann man die GREENS-Funktion mit

$$\begin{aligned} G(x, x', \omega) &= [-2i\omega]^{-1} \exp[i\omega |x - x'|] \\ &\quad + A(x') e^{i\omega x} + B(x') e^{-i\omega x} \end{aligned} \quad (7.11)$$

ansetzen. Für den Reflexionskoeffizienten des linken und rechten Halbraums kann man auf (B5) bzw. (5.10) zurückgreifen und die von der Quelle nach links und rechts abgestrahlten Amplituden  $b_{-1}$  und  $a_1$  mit den einfallenden Amplituden  $b_1$  und  $a_{-1}$ , die jeweils durch die Reflexionen der Kristalle hervorgerufen werden, unter Beachtung einer zusätzlichen Phase in Beziehung setzen (siehe Abb.21),

$$b_1 = \mathcal{R}_R(\omega) e^{2id_R\omega} a_1 , \quad (7.12)$$

$$a_{-1} = \mathcal{R}_L(\omega) e^{2id_L\omega} b_{-1} . \quad (7.13)$$

Je nachdem, ob der Beobachter sich links oder rechts von der Quelle befindet, lassen sich die einfallenden und auslaufenden Amplituden unterschiedlich durch die Unbekannten  $A(x')$  und  $B(x')$  ausdrücken,

$$x > x' : \quad a_1 = -\frac{e^{-i\omega x'}}{2i\omega} + A(x')$$

$$b_1 = B(x') ,$$

$$x < x' : \quad b_{-1} = -\frac{e^{i\omega x'}}{2i\omega} + B(x')$$

$$a_{-1} = A(x') ,$$

so daß sich zusammen mit (7.12) und (7.13) ein Gleichungssystem ergibt:

$$B(x') = -\frac{\mathcal{R}_R(\omega)}{2i\omega} e^{i\omega(2d_R - x')} + \mathcal{R}_R(\omega) e^{2id_R\omega} A(x') ,$$

$$A(x') = -\frac{\mathcal{R}_L(\omega)}{2i\omega} e^{i\omega(2d_L + x')} + \mathcal{R}_L(\omega) e^{2id_L\omega} B(x') .$$

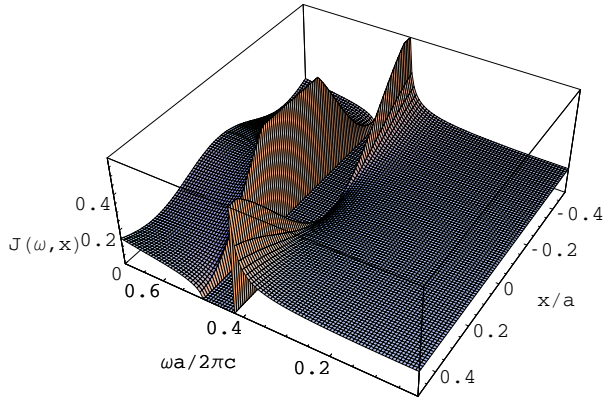


Abbildung 22: Lokale Zustandsdichte nach (7.15) für eine Polarisierbarkeit  $\alpha=0.2a + i0a$  im Frequenzintervall  $0 < \omega a/2\pi c < 0.7$ . Wie zu erwarten war, stimmt das Ergebnis mit dem aus (7.5) überein. Quelle und Beobachter werden dabei zusammen immer vom Zentrum der Einheitszelle aus verschoben. Im ersten Band wird ein lokales Minimum bei  $x=0$  erkennbar, im zweiten Band treten neben dem lokalen Maximum bei  $x=0$  zwei Minima in Erscheinung.

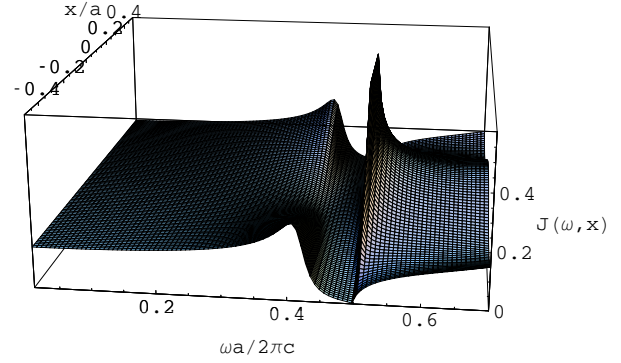


Abbildung 23: Wie Abb.22, jedoch mit schwacher Absorption  $\alpha=0.2a + i0.05a$ . Im Extremfall starker Absorption lösen sich die Bandlücken auf. Das ist im allgemeinen auch das, was man bei endlichen, periodischen Strukturen beobachten kann.

Durch Auflösen des Gleichungssystems ergibt sich für die

Koeffizienten:

$$B(x') = \frac{i}{2\omega} \left\{ \frac{\mathcal{R}_R(\omega)e^{i\omega(2d_R-x')} + \mathcal{R}_R(\omega)\mathcal{R}_L(\omega)e^{2i\omega(d_L+d_R)}e^{i\omega x'}}{1 - \mathcal{R}_R(\omega)\mathcal{R}_L(\omega)e^{2i\omega(d_L+d_R)}} \right\},$$

$$A(x') = \frac{i}{2\omega} \left\{ \frac{\mathcal{R}_L(\omega)e^{i\omega(2d_L+x')} + \mathcal{R}_L(\omega)\mathcal{R}_R(\omega)e^{2i\omega(d_L+d_R)}e^{-i\omega x'}}{1 - \mathcal{R}_R(\omega)\mathcal{R}_L(\omega)e^{2i\omega(d_L+d_R)}} \right\}$$

und damit letztendlich für die GREENS-Funktion nach (7.11):

$$G(x, x', \omega) = -\frac{e^{i\omega|x-x'|}}{2i\omega} - \frac{1}{2i\omega} \left\{ \frac{\mathcal{R}(\omega)e^{i\omega(2d_L+x'+x)} + \mathcal{R}(\omega)e^{i\omega(2d_R-x-x')} + 2\mathcal{R}^2(\omega)e^{2i\omega(d_L+d_R)} \cos[\omega(x-x')]}{1 - \mathcal{R}^2(\omega)e^{2i\omega(d_L+d_R)}} \right\}. \quad (7.14)$$

Dabei ist mit

$$\mathcal{R}_L(\omega) = \mathcal{R}_R(\omega)$$

die Symmetrie des gesamten Kristalls berücksichtigt worden. Bei Verwendung des Reflexionskoeffizienten  $\mathcal{R}(\omega)$  nach (5.10) muß man wieder zusätzlich eine Phase  $-\omega a/2$  berücksichtigen. Befindet sich die Quelle in der Mitte der Einheitszelle mit  $d_L=d_R=a/2$  im Ursprung bei  $x'=0$ , hat sie die richtige Phasenlage und man kann die GREENS-Funktion (7.14) mit der bereits zuvor bestimmten effektiven GREENS-Funktion (6.30) vergleichen. Beide besitzen im Nenner denselben FABRY-PEROT-Term und stimmen

an der Stelle  $x=x'=ma=0$  bis auf den zusätzlichen Korrekturterm zur Strahlung in (6.30) überein. Die GREENS-Funktion (6.30) ist daher für das eingeschränkte Gebiet als das Feld einer Punktquelle zu verstehen, die nicht einfach nur strahlt, sondern auch zusätzlich absorbierende und reflektierende Eigenschaften besitzt.

Die lokale Zustandsdichte kann mit Hilfe von (7.10) bestimmt werden. Dabei muß mit  $\mathcal{R}(\omega)$  die richtige Phasenlage beibehalten werden. Der Beobachter muß also zusammen mit der Quelle die Einheitszelle immer vom Ursprung bei  $x'=0$  bzw. von der Mitte der Einheitszelle aus durchlaufen. Dazu führe man entsprechend mit

$$\begin{aligned} d_R - x &= -\tilde{x} , \\ d_L + x &= \tilde{x} \end{aligned}$$

in (7.14) eine Koordinatentransformation durch und für die LDOS ergibt sich:

$$\begin{aligned} \mathcal{J}(x, \omega) &= \frac{\omega}{\pi} \Im [G(x, x, \omega)] \\ &= \frac{1}{2\pi} \Re \left\{ \frac{1 + \mathcal{R}^2(\omega) + 2\mathcal{R}(\omega) \cos(2\omega\tilde{x})}{1 - \mathcal{R}^2(\omega)} \right\} . \end{aligned} \quad (7.15)$$

Das Ergebnis stimmt mit dem in [BH03] publizierten überein. Die neue Koordinate  $\tilde{x}$ , die man jetzt von der Mitte der Einheitszelle aus mißt, bleibt dabei auf das Intervall

$$\tilde{x} \in \left[ -\frac{a}{2}, \frac{a}{2} \right]$$

beschränkt. Mit (7.15) ist die lokale Zustandsdichte innerhalb der Einheitszelle symmetrisch zum Zentrum bei  $\tilde{x}=0$ , das hätte man aber auch ohnehin fordern müssen, da mit der Translationssymmetrie der Anordnung die Wahrscheinlichkeit für den Zerfall eines angeregten Atoms nicht durch eine spezielle Richtung ausgezeichnet werden darf.

### 7.3.2. Lokale Minima und Maxima

Die LDOS weist mit der Bandstruktur innerhalb der Einheitszelle lokale Minima und Maxima auf, die die Zerfallsrate dementsprechend beeinflussen. Da es sich bei einer Einheitszelle um ein abgeschlossenes Intervall handelt, nimmt die LDOS (7.15) auf den Rändern des Intervalls  $[-a/2, a/2]$  ein Extremum an. Für die Minima und Maxima in der Einheitszelle ergibt sich aus (7.15):

$$\tilde{x}_E = \frac{k\pi}{2\omega} , \quad k \in \mathbb{Z} , \quad -\frac{\omega a}{\pi} < k < \frac{\omega a}{\pi} .$$

Nach 5.1 besitzen mit (5.7) die Bänder immer eine untere von der Polarisierbarkeit  $\alpha$  unabhängige Bandkante bei  $\omega a = (n-1)\pi$ , wobei  $n \in \mathbb{N}$  hier jetzt die Bandnummer darstellen soll. Die Minima und Maxima verlaufen kontinuierlich durch das jeweilige Band  $n$ , so daß man mit

$$1 - n < k < n - 1$$

für die LDOS immer  $2n-1$  lokale Extrema im Band  $n$  vorfinden wird, wenn man das Modell der Punktstreuer verwenden will. Die Frage, ob es sich dabei um ein Minimum oder Maximum handelt, wird dabei nach (7.15) durch

$$\cos(k\pi) \Re \left[ \frac{\mathcal{R}(\omega)}{\mathcal{R}^2(\omega) - 1} \right] \leq 0 , \quad k \in \{1-n, 0, n-1\}$$

entschieden.

QED in periodischen und absorbierenden Medien

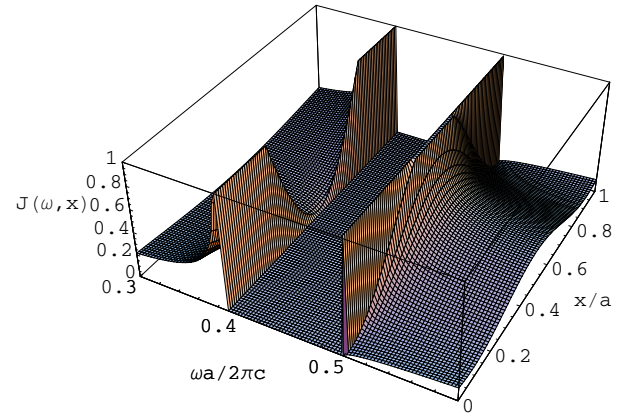


Abbildung 24: Lokale Zustandsdichte nach (7.19), die mit Hilfe von Blochmoden bzw. den normierten Eigenvektoren der Transfermatrix (5.5) kontruiert worden ist. Gezeigt wird die LDOS für ein Frequenzintervall  $0.3 < \omega a / 2\pi c < 0.7$  und eine Polarisierbarkeit  $\alpha = 0.3a + i0a$ .

## 7.4. Absorptionsfreier Zerfall

Mit den Einschränkungen, denen sie unterliegt, muß auch die Modenzerlegung zum selben Ergebnis für die lokale Zustandsdichte führen. Nach 4.3 sind die Modenfunktionen bzw. die Blochmoden mit den Eigenvektoren der Transfermatrizen identisch. Betrachtet man nur das Gebiet einer Einheitszelle, seien diese auf die Periode  $a$  des Gitters normiert,

$$\int_{\text{WS}} dx \epsilon(x) A_{km}(x) A_{k'm'}^*(x) = a \delta_{kk'} \delta_{mm'} , \quad (7.16)$$

dabei ist mit  $m$  in diesem Fall die Bandnummer gekennzeichnet worden. Die Erzeuger und Vernichter der Modenanregungen sind wieder Bosonen,

$$[\hat{\mathbf{a}}_{km} \hat{\mathbf{a}}_{k'm'}^\dagger] = \delta_{kk'} \delta_{mm'} ,$$

so daß man für den Vakuumgrundzustand wieder

$$\langle \hat{\mathbf{a}}_{km}^\dagger \hat{\mathbf{a}}_{k'm'} \rangle_{\text{Vac}} = 0 ,$$

$$\langle \hat{\mathbf{a}}_{km} \hat{\mathbf{a}}_{k'm'} \rangle_{\text{Vac}} = 0 ,$$

$$\langle \hat{\mathbf{a}}_{km}^\dagger \hat{\mathbf{a}}_{k'm'}^\dagger \rangle_{\text{Vac}} = 0$$

erhält. Aus der Modenzerlegung (6.8) des Strahlungsfeldes ergibt sich somit für die lokale Zustandsdichte aus (7.9):

$$\mathcal{J}(x, \omega) = \frac{1}{2a} \sum_{k,m} |A_{km}(x)|^2 \delta(\omega_{km} - \omega) .$$

Aufgrund der Periodizität kann der reziproke Raum in einzelne BRILLOUINzonen unterteilt werden, so daß sich

für die erlaubten  $k$ -Werte

$$k = 2\pi \frac{l}{a}, \quad l \in \mathbb{Z}$$

ergibt. Für große Systeme wird der Abstand  $\Delta k = 2\pi/a$  aufeinanderfolgender Punkte immer kleiner. Deshalb können die *Impulssummen* in Integrale umgewandelt werden:

$$\begin{aligned} \frac{1}{a} \sum_k \dots &= \frac{1}{a} \frac{a}{2\pi} \sum_k \Delta k \dots \\ &\rightarrow \frac{1}{2\pi} 2 \int_0^{\pi/a} dk \dots \end{aligned}$$

In der letzten Zeile braucht man sich aufgrund der Periodizität wieder nur auf die erste BRILLOUINzone zu beschränken, da die photonische Bandstruktur  $\omega(k)$  symmetrisch ist, sogar nur auf die halbe BRILLOUINzone. Mit dem so gewonnenen Modenkontinuum ergibt sich die lokale Zustandsdichte zu:

$$\mathcal{J}(x, \omega) = \frac{1}{2\pi} \sum_m \int_0^{\pi/a} dk |A_m(k, x)|^2 \delta(\omega_m(k) - \omega). \quad (7.17)$$

Um das Integral ausführen zu können, muß man die Bandstruktur  $\omega(k)$  kennen. Nach (3.6) folgt mit  $\lambda_+(\omega)$  aus (5.9):

$$k(\omega) = -\frac{\Im[\ln \lambda_+(\omega)]}{a}, \quad k(\omega) \in \mathbb{R}, \quad (7.18)$$

wobei man zu berücksichtigen hat, daß im Fall verschwindender Absorption nur reelle  $k$  erlaubt sind. Inversion von  $k(\omega)$  führt zur Bandstruktur des photonischen, absorptionsfreien Kristalls aus  $\delta$ -Streuern (siehe Abb.2). Wenn man

$$\omega \in \left[ \omega_m(0), \omega_m\left(\frac{\pi}{a}\right) \right]$$

beachtet, folgt für (7.17) mit (7.18):

$$\begin{aligned} \mathcal{J}(x, \omega) &= \frac{1}{2\pi} \sum_m \int_{\omega_m(0)}^{\omega_m(\pi/a)} d\omega_m \left| \frac{\partial k(\omega_m)}{\partial \omega_m} \right| \\ &\quad \times |A(\omega_m, x)|^2 \delta(\omega_m - \omega) \\ &= \frac{1}{2\pi} \sum_m \delta_{mm'} \left| \frac{\partial \Im[\ln \lambda^+(\omega a)]}{\partial(\omega a)} \right| |A(\omega, x)|^2 \\ &= \frac{1}{2\pi} \left| \frac{\partial \Im[\ln \lambda^+(\omega a)]}{\partial(\omega a)} \right| |A(\omega, x)|^2. \end{aligned} \quad (7.19)$$

Für die nun durch die Dispersionsrelation  $k = k(\omega)$  eingeführte Zustandsdichte ist dabei der Betrag notwendig, um zu garantieren, daß immer in positive Richtung integriert wird. Die Modenfunktionen  $A(\omega, x)$  sind durch die entsprechend normierten Eigenvektoren der Transfermatrix (5.5) in der Basis einlaufender und auslaufender Wellen zu ersetzen (siehe C).

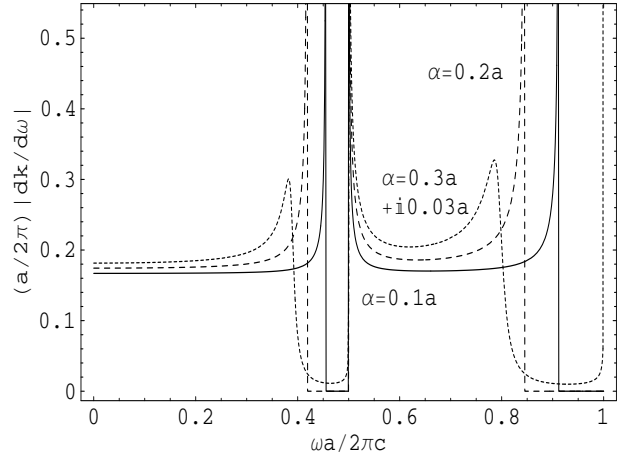


Abbildung 25: Integrierte Zustandsdichte eines eindimensionalen Kristalls aus Punktstreuern. Gezeigt wird das erste und zweite Band bei einer Polarisierbarkeit  $\alpha = 0.1a + i0a$ ,  $\alpha = 0.2a + i0a$  und einer schwachen Absorption  $\alpha = 0.3a + i0.03a$  der verwendeten Punktstreuer. Neben der Vergrößerung der Bandlücke beeinflusst die Polarisierbarkeit auch die Zustandsdichte in den einzelnen Bändern. Die integrierte Zustandsdichte zählt die Anzahl der Moden  $\Delta k$  pro Frequenzintervall  $\Delta\omega$ , die zur Anregung in der Einheitszelle in der einen Hälfte der BRILLOUINzone zur Verfügung stehen. Je mehr davon vorhanden sind, desto schneller strahlt der Dipol. Im Fall schwacher Absorption tritt in FERMIs Goldener Regel auch eine Übergangswahrscheinlichkeit innerhalb der Bandlücke auf. Die ideale Bandstruktur wird daher aus Kausalitätsgründen immer verletzt werden.

#### 7.4.1. Die integrierte Zustandsdichte

In dem für die Modenzerlegung gültigen Rahmen verschwindender Absorption liefert diese Form der lokalen Zustandsdichte die gleichen Ergebnisse wie die vorherigen Herangehensweisen zur Bestimmung dieser. (vgl. Abb.13 mit Abb.24). Die Modenfunktionen sind nach (7.16) normiert, so daß sich für die integrierte Zustandsdichte der mit der lokalen Zustandsdichte allgemein gültige Zusammenhang

$$\begin{aligned} \int_{\text{WS}} dx \epsilon(x) \mathcal{J}(x, \omega) &= \frac{1}{2\pi} \left| \frac{\partial \Im[\ln \lambda^+(\omega)]}{\partial(\omega)} \right| \\ &= \frac{a}{2\pi} \left| \frac{\partial k(\omega)}{\partial \omega} \right| \\ &= \frac{1}{2} \sum_{k,m} \delta(\omega_{km} - \omega) \end{aligned}$$

formulieren läßt. Die LDOS, die mit (7.8) in (7.9) definiert wurde, ist also gerade so normiert, daß die integrierte Zustandsdichte die zur Anregung erlaubten Moden in der einen Hälfte der BRILLOUINzone zählt. Für gewöhnlich normiert man die LDOS auf die lokale Zustandsdichte des Vakuums, in diesem Fall zählt die integrierte Zustandsdichte wieder die Moden in der gesamten zur



Verfügung stehenden BRILLOUINzone. FERMIs Goldene Regel muß aber unabhängig von der Normierung immer auf dasselbe Ergebnis für die Zerfallsrate der spontanen Emission führen. Integriert man die lokale Zustandsdichte (7.15) zusammen mit dem *Gewicht*  $\epsilon(x)$ , so erhält man für die integrierte Zustandsdichte mit  $\alpha(\omega)=\alpha$ :

$$\begin{aligned} \frac{a}{2\pi} \left| \frac{\partial k}{\partial \omega} \right| &= \int_{-a/2}^{a/2} d\tilde{x} \left[ 1 + \alpha \delta \left( \tilde{x} + \frac{a}{2} \right) \right. \\ &\quad \left. + \alpha \delta \left( \tilde{x} - \frac{a}{2} \right) \right] \mathcal{J}(\tilde{x}, \omega) \\ &= \frac{1}{2\pi} \Re \left\{ \frac{\omega a + \omega a \mathcal{R}^2(\omega) + 2\mathcal{R}(\omega) \sin(\omega a)}{\omega - \omega \mathcal{R}^2(\omega)} \right\} \\ &\quad + \frac{1}{2\pi} \Re \left\{ \frac{\alpha + \alpha \mathcal{R}^2(\omega) + 2\alpha \mathcal{R}(\omega) \cos(\omega a)}{1 - \mathcal{R}^2(\omega)} \right\}, \end{aligned}$$

dabei beachte man, daß die Punktstreuer an den beiden Enden der Einheitszelle jeweils nur zur Hälfte in das Integral mit eingehen können. Man kann ohne weiteres numerisch verifizieren, daß die so gefundene integrierte Zustandsdichte mit dem sich aus (6.49) für den Fall  $\Im(\alpha) \rightarrow 0$  ergebenden Ausdruck übereinstimmt.

Im Fall der Modenzerlegung kann man leicht sehen, wie die Zerfallsrate im Fall von FERMIs Goldener Regel neben dem Übergangsdipolmoment direkt durch die Zustandsdichte beeinflusst wird,

$$\begin{aligned} \gamma_{e \rightarrow g} &= 2\pi \sum_{k,m} \left| \langle g, 1_{km} | \hat{\mathbf{d}} \hat{\mathbf{E}}(x) | e, 0 \rangle \right|^2 \delta(\omega_{km} - \omega) \\ &= 2a \left| \frac{\partial k(\omega)}{\partial \omega} \right| \left| \langle g, 1_{km} | \hat{\mathbf{d}} \hat{\mathbf{E}}(x) | e, 0 \rangle \right|^2. \end{aligned}$$

Dabei beachte man, daß in der Modenzerlegung (6.8) die Richtung der sich ausbreitenden, linear polarisierten Moden berücksichtigt werden muß bzw. die gesamte BRILLOUINzone mit einzubeziehen ist und mit  $|g, 1_{km}\rangle$  eine angeregte Mode im Band  $m$  zu verstehen ist.

## 8. DIE BANDSTRUKTUR UND ABSORPTION

In den vorherigen Abschnitten ist bereits der Einfluß der Absorption in periodischen Systemen und damit eine Annäherung an die in der Realität vorkommenden Strukturen kenntlich gemacht worden. Dabei hat sich das durch HUTTNER und BARNETT vorgeschlagene Quantisierungsschema [HB92] als besonders vorteilhaft gegenüber dem nur begrenzt einsetzbaren Prinzip der Modenzersetzung erwiesen. Die Frage, die es nun im letzten Teil dieser Arbeit noch zu klären gilt, ist, was mit der Bandstruktur im Fall auftretender Absorption passieren wird.

### 8.1. Komplexe Frequenzen und Kristallimpulse

Mit den in 3.1 vorgebrachten Argumenten ist der Pseudoimpuls  $k(\omega)$  als eine rein reelle Größe eingeführt worden. Die Forderung bei vorhandener Absorption einen Eigenwert

$$\lambda_+(\omega) = e^{ik(\omega)a}$$

des Translationsoperators innerhalb des Einheitskreises zu wählen, führt zu einer Funktion  $k(\omega)$ , die durch reelle Frequenzen parametrisiert wird und in der komplexen Ebene liegt. Damit wird aber nur die Dämpfung der sich in der Struktur räumlich ausbreitenden Felder berücksichtigt. Die Bandstruktur muß das Ergebnis der vollständigen Lösung der zeitabhängigen MAXWELL-Gleichungen widerspiegeln und den zeitlichen Zerfall mit berücksichtigen.

Wird bei vorhandener Absorption die Dielektrizitätsfunktion  $\epsilon(\vec{r}, \omega)$  bzw. die Polarisierbarkeit  $\alpha(\omega)$  eine komplexe Funktion, so wird auch die Funktion  $k(\omega)$  bzw. die Funktion  $\omega(k)$  eine Funktion in der komplexen Ebene [HLJ<sup>+</sup>04]. Die Bandstruktur wird dann zu einem doppelt komplexen Objekt mit

$$h(k, \omega) = 0 \quad , \quad \omega, k \in \mathbb{C} .$$

Der Teil  $\{(k, \omega) : \omega \in \mathbb{R}\}$  der Lösungsmenge beschreibt dabei die Wellen, die als Lösung der Wellengleichung mit räumlich veränderlicher Phasengeschwindigkeit in der ausgedehnten, periodischen Struktur räumlich gedämpft werden und mit dem bereits zuvor eingeführten Transfermatrixformalismus beschrieben werden können. Während die Lösungsmege  $\{(k, \omega) : k \in \mathbb{R}\}$  den zeitaufgelösten Zerfall der erlaubten Moden wiedergibt und die direkte Lösung der zeitabhängigen MAXWELL-Gleichungen mit Hilfe eines BLOCH-Zustandes, der mit Hilfe einer reellen Wellenzahl konstruiert worden ist, erfordert [HLJ<sup>+</sup>04]. Der Begriff Bandstruktur hat mit dem ursprünglich eingeführten Begriff dann nur noch recht wenig gemein, da zum einen mehrere Parameter miteinander verglichen werden müssen und von vornherein nicht klar ist, wie ein *Band* in diesem Zusammenhang zu definieren ist und inwieweit die Bänder überhaupt noch durch Bandlücken abgetrennt werden.

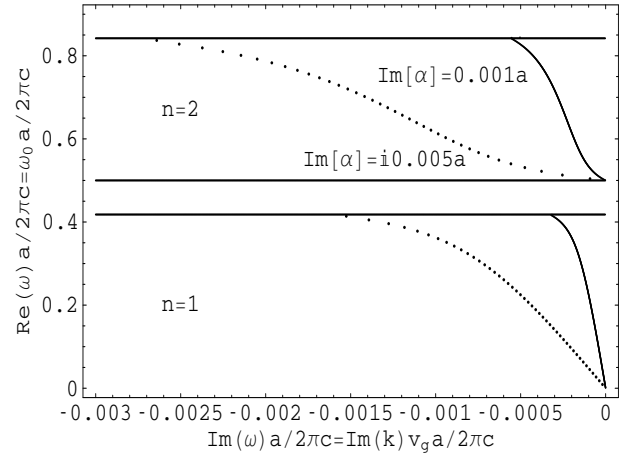


Abbildung 26: Darstellung der komplexen Frequenzebene einer doppelt komplexen Bandstruktur  $h(k_0, \omega_0 + i\delta\omega_2) = 0$  eines unendlich ausgedehnten, eindimensionalen Gitters aus Punktstreuern bei vorhandener Absorption  $\alpha = 0.2a + i0.005a$  und  $\alpha = 0.2a + i0.001a$ . Gezeigt wird das Frequenzintervall des ersten Bandes und des zweiten Bandes der absorptionsfreien Bandstruktur  $k_0(\omega_0)$ . Dabei ist die Näherung (8.2) verwendet worden, um mit Hilfe eines  $\delta k_2$  das betreffende  $\delta\omega_2$  zu konstruieren ohne die zeitabhängigen MAXWELL-Gleichungen mit einem reellen  $k$ -Zustand zu lösen. In der Realität lösen sich die Bandlücken mit zunehmender Absorption immer mehr auf. Die Näherung in (8.2) mit Hilfe der Gruppengeschwindigkeit verliert in diesem Fall ihre Gültigkeit und kann nur als Richtwert verwendet werden.

Die Zustände, die im absorptionsfreien Fall durch Blochmoden beschrieben werden, zerfallen weder zeitlich noch unterliegen die Modenfunktionen einer Dämpfung. Die Lösungen  $\{(k, \omega) : \omega \in \mathbb{R}\}$  und  $\{(k, \omega) : k \in \mathbb{R}\}$  fallen daher in diesem Fall auf den jeweiligen reellen Achsen zusammen und ergeben für das hier verwendete Modell aus unendlich vielen Punktstreuern die in 3.1 mit Abb.2 ausgewiesene Bandstruktur  $k_0(\omega_0)$ . Die durch die Lösungen  $\{(k, \omega) : \omega \in \mathbb{R}\}$  und  $\{(k, \omega) : k \in \mathbb{R}\}$  beschriebenen Zustände können nicht völlig unabhängig voneinander sein. Betrachte man zwei Elemente der beiden Lösungsmengen im Limes verschwindender Absorption in demselben BLOCH-Zustand  $(k_0, \omega_0)$  mit  $k_0, \omega_0 \in \mathbb{R}$ ,

$$(k_0, \omega_0 + \delta\omega_1 + i\delta\omega_2) \quad , \quad \delta\omega_1, \delta\omega_2 \in \mathbb{R} ,$$

$$(k_0 + \delta k_1 + i\delta k_2, \omega_0) \quad , \quad \delta k_1, \delta k_2 \in \mathbb{R}$$

und die mit

$$h(k, \omega) = h(k_0, \omega_0) + (k - k_0) \left. \frac{\partial h}{\partial k} \right|_{k_0, \omega_0} + (\omega - \omega_0) \left. \frac{\partial h}{\partial \omega} \right|_{k_0, \omega_0} + O(k^2, \omega^2) \quad (8.1)$$

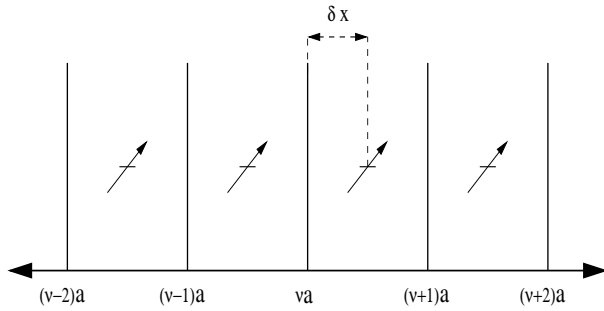


Abbildung 27: Prinzipskizze zur Bestimmung des Einflusses von Absorption auf die Bandstruktur eines unendlich ausgedehnten Gitters aus Punktstreuern mit Hilfe einer kollektiven Dipolkette. In jeder Einheitszelle befindet sich ein Punktdipol. Jeder dieser Dipole soll sich mit dem einheitlichen Abstand  $\delta x$  zum Streuer in der linken Ecke der Einheitszelle befinden.

die Bedingung  $h(k, \omega) = 0$  erfüllen,

$$-h(k_0, \omega_0) = (\delta k_1 + i\delta k_2) \left. \frac{\partial h}{\partial k} \right|_{k_0, \omega_0},$$

$$-h(k_0, \omega_0) = (\delta \omega_1 + i\delta \omega_2) \left. \frac{\partial h}{\partial \omega} \right|_{k_0, \omega_0}.$$

Setzt man schwache Absorption voraus und nimmt an, daß man sich an einem Punkt befindet, in dem sich die ursprüngliche Bandstruktur  $k_0(\omega_0)$  nicht großartig verändert,  $\delta \omega_1 \approx 0$ ,  $\delta k_2 \approx 0$ , sind die Störungen  $\delta \omega_2$ ,  $\delta k_2$  der die BLOCH-Zustände beschreibenden Bandstruktur  $k_0(\omega_0)$  in die komplexe Ebene sehr klein, so daß man höhere Ordnungen in (8.1) vernachlässigen kann. Der Zusammenhang zwischen den Störungen  $\delta \omega_2$  und  $\delta k_2$ , die die ursprüngliche Bandstruktur nun auf den jeweiligen imaginären Achsen zu *verschmieren* beginnen, ist in diesem Fall durch die Gruppengeschwindigkeit gegeben [HLJ<sup>+</sup>04],

$$\delta \omega_2 = \delta k_2 \left. \frac{\partial \omega}{\partial k} \right|_{k_0, \omega_0}. \quad (8.2)$$

Mit Hilfe der Gruppengeschwindigkeit ist man also in der Lage den räumlichen und zeitaufgelösten Zerfall eines BLOCH-Zustandes direkt miteinander zu vergleichen (siehe Abb.26). Es ist klar, daß (8.2) neben der Forderung schwacher Absorption mit (8.1) nur als Näherung für die unteren Bänder Gültigkeit behalten kann. Auf der Bandkante verschwindet bekanntermaßen die Gruppengeschwindigkeit, so daß die Aussagekraft von (8.2) in der Nähe der Bandkanten in Frage zu stellen ist.

## 8.2. Zerfallsrate einer Dipolkette

Um bei vorhandener Absorption auch die Veränderungen der ursprünglichen Bandstruktur  $k_0(\omega_0)$  durch ein

$\delta k_1 \neq 0$  und  $\delta \omega_1 \neq 0$  sichtbar zu machen, kann man sich eines Tricks bedienen, indem man die Feldfluktuationen selektiv nach  $\omega$  und  $k$  sondiert. Dazu betrachte man eine Kette von  $2N+1$  punktförmigen Dipolen mit dem Dipolmoment  $d$  und einer bestimmten Phasendifferenz,

$$P(x, t) = \sum_{\nu=-N}^N d e^{i(kx - \omega t)} \delta(x - x_\nu) + \text{h. c.},$$

$$H_{\text{int}} = - \int_L dx P(x, t) E(x, t),$$

wobei in dem Modell aus Punktstreuern jede von  $2N+1$  Einheitszellen einen Dipol zu beinhalten hat (siehe Abb.27),

$$x_\nu = \nu a + \delta x, \quad \nu \in \{-N, \dots, N\}.$$

Diese Anordnung soll eine klassische, oszillierende Stromverteilung ersetzen, dessen Strahlungsfeld wieder durch das inhomogene Hintergrundmedium beeinflusst wird.

Den Kunstgriff, den man sich nun zu Nutze machen kann, ist mit Hilfe von FERMIS Goldener Regel die Zerfallsrate dieses *kollektiven* Dipols zu bestimmen. Im Fall von Absorption wird auch eine Zerfallsrate für Paare  $(k, \omega)$  mit  $k, \omega \in \mathbb{R}$  existieren, die nicht auf der durch  $k_0(\omega_0)$  vorgeschriebenen Bandstruktur liegen, wodurch die Information über die veränderte Bandstruktur indirekt sichtbar gemacht werden kann.

Es ist klar, daß das Verfahren mit einem einzigen punktförmigen Dipol nicht mehr funktionieren kann, da aufgrund der fehlenden Phasendifferenz die Information über die Bandstruktur verloren gehen würde. Das Ergebnis wird präzise, wenn mit  $N \rightarrow \infty$  in jede Einheitszelle der unendlich ausgedehnten Struktur auch ein Punktdipol gesetzt wird.

Die Punktdipole sollen im SCHRÖDINGER-Bild wieder durch Zwei-Niveau-Systeme beschrieben werden. Der Darstellungsraum der die Dipolkette zu kennzeichnenden Zustände ist dann der Produktraum der für die einzelnen Dipole zu verwendenden unitären Räume,

$$\bigotimes_{\nu=-N}^N |j_\nu\rangle, \quad j \in \{e, g\}.$$

Die Kopplung an das Strahlungsfeld ist gemäß 7 wieder durch

$$\hat{H}_{\text{int}} = - \sum_{\nu=-N}^N \hat{\mathbf{d}}_\nu \hat{\mathbf{E}}(x_\nu)$$

gegeben. Dabei muß der Operator des Übergangsdipolmoments aus den Flipoperatoren des Produktraums der die Dipolkette beschreibenden Zustände konstruiert werden,

$$\hat{\mathbf{d}}_\nu = d |g_{-N}, \dots, g_\nu, \dots, g_N\rangle \langle g_{-N}, \dots, e_\nu, \dots, g_N| + d^* |g_{-N}, \dots, e_\nu, \dots, g_N\rangle \langle g_{-N}, \dots, g_\nu, \dots, g_N|.$$

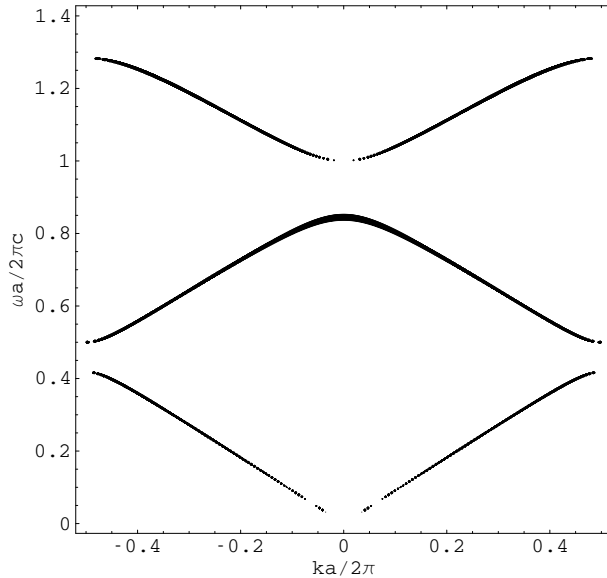


Abbildung 28: Höhenliniendiagramm für die Zerfallsrate der Dipolkette bei einer Polarisierbarkeit  $\alpha=0.2a + i0a$  im Intervall  $0 < \omega a/2\pi c < 1.4$ ,  $-0.5 < ka/2\pi < 0.5$ . Die Dipole befinden sich mit  $\delta x=a/2$  alle im Zentrum der Einheitszellen. Bei immer schwächer werdender Absorption fällt nach D das Höhenliniendiagramm mit der ursprünglichen Bandstruktur  $k_0(\omega_0)$  der Punktstreueranordnung zusammen (siehe Abb.2), die Bandlücken treten immer schärfer in den Vordergrund.

Mit dem Index  $\nu$  kann dabei diskret zwischen den Anregungen der Dipole in den einzelnen Einheitszellen unterschieden werden. Die entscheidende Phaseninformation kann man direkt den Zuständen zuordnen. Zum Zeitpunkt  $t=0$  ergibt sich damit für den entsprechend normierten Zustand Feld-Dipolkette:

$$|\Psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2N+1}} \sum_{\nu=-N}^N e^{ikx_\nu} |g_{-N}, \dots, e_\nu, \dots, g_N, 0\rangle .$$

Die Zeitentwicklung spielt im Weiteren keine Rolle, es interessiert lediglich das beim Übergang in den Grundzustand

$$|\Phi\rangle = |g_{-N}, \dots, g_N, 1_{\omega m}\rangle$$

zur Verfügung stehende Frequenzspektrum der daraus hervorgehenden Feldanregungen. Aus FERMIs Goldener Regel ergibt sich für die Zerfallsrate der kollektiven Dipolkette:

$$\gamma_{e \rightarrow g} = 2\pi \sum_m \int_0^\infty d\omega \left| \sum_{\nu=-N}^N \langle \Phi | \hat{\mathbf{d}}_\nu \hat{\mathbf{E}}(x_\nu) | \Psi \rangle \right|^2 \times \delta(\omega - \omega_{eg})$$

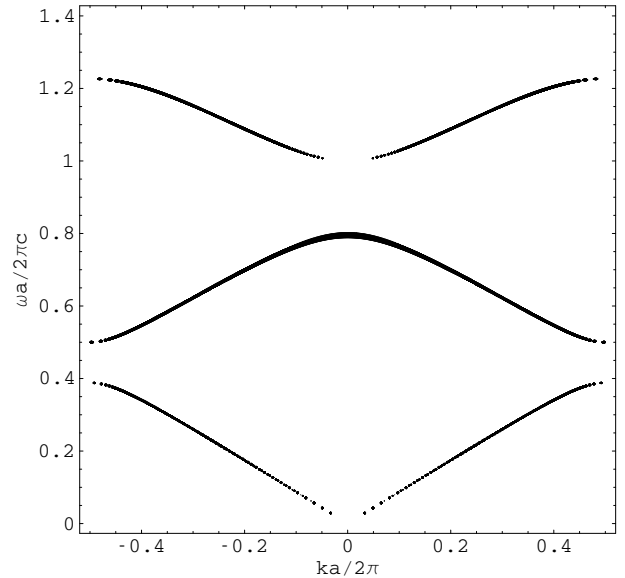


Abbildung 29: Wie Abb.28, jedoch mit einer Dispersion  $\alpha=0.3a + i0a$ . Im Bereich um  $k=0$  wird die Zerfallsrate zu schmal, um bei gleichbleibender Genauigkeit erfasst zu werden.

oder mit dem quantisierten Strahlungsfeld (6.16):

$$\gamma_{e \rightarrow g} \stackrel{(6.16)}{=} 2 |d|^2 \frac{\omega_{eg}^4 \Im[\alpha(\omega)]}{2N+1} \sum_{\mu, \nu=-N}^N \sum_m e^{ika(\nu-\mu)} \times G_{\text{eff}}^*(\nu a + \delta x) G_{\text{eff}}(\mu a + \delta x) . \quad (8.3)$$

Die umfangreiche Rechnung zur Bestimmung der Zerfallsrate mit Hilfe der effektiven GREENs-Funktion (6.33) kann D entnommen werden. Wie in den Abbildungen 28 bis 35 zu erkennen ist, läßt sich die Bandstruktur mit Hilfe der Zerfallsrate der Dipolkette in der Tat wiederfinden. Den Erwartungen entsprechend tritt mit immer stärker werdender Absorption eine Tendenz zum Auflösen der Bandlücken in Erscheinung. Diese deckt sich mit den in 7.1 bereits gemachten Erfahrungen mit Hilfe der lokalen Zustandsdichte, die ebenfalls in den Bandlücken eine Zerfallsrate ungleich null für Zwei-Niveau-Systeme zuläßt, so daß die durch die Absorption des Gitters stärkste hervorgerufene Verbreiterung der Bandstruktur  $k_0(\omega_0)$  vorrangig immer in der Nähe der von der Polarisierbarkeit abhängigen Bandkanten zu suchen ist.

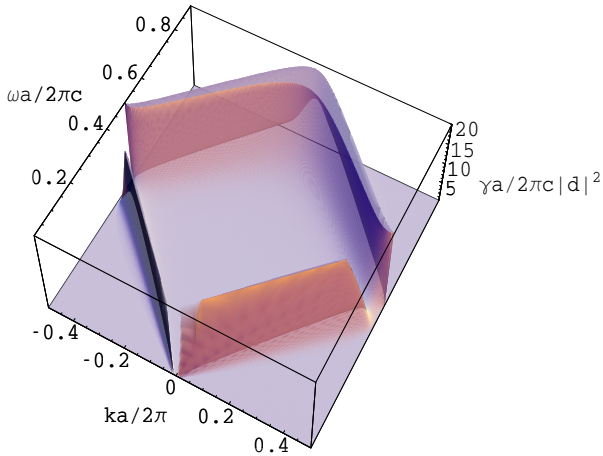


Abbildung 30: Zerfallsrate einer Dipolkette nach (8.3) im Intervall  $0 < \omega a / 2\pi c < 0.9$ ,  $-0.5 < ka / 2\pi < 0.5$  in einer eindimensionalen,  $\infty$ -periodischen Anordnung aus Punktstreuern bei schwacher Absorption mit einer Polarisierbarkeit  $\alpha = 0.2a + i0.05a$ . Die Dipole befinden sich alle im Zentrum der Einheitszellen.

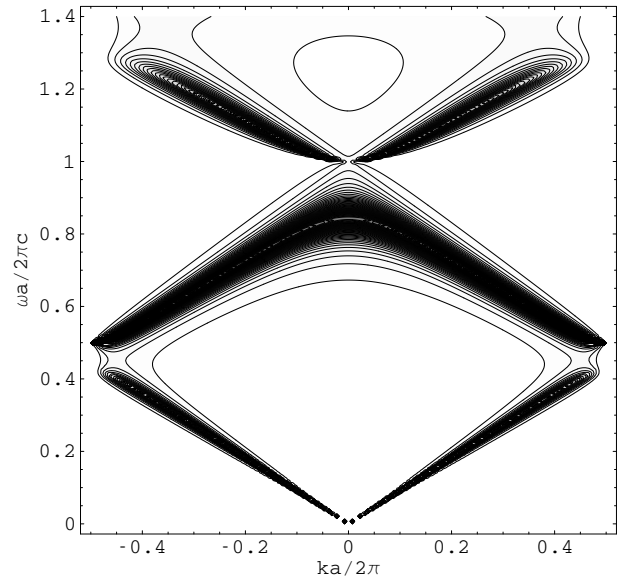


Abbildung 31: Höhenliniendiagramm für die nach (8.3) bestimmte Zerfallsrate einer Dipolkette in der eindimensionalen Punktstreuernanordnung. Gezeigt wird die Zerfallsrate wie in Abb.30 und Abb.32 bei schwacher Absorption  $\alpha = 0.2a + i0.05a$  im Intervall  $0 < \omega a / 2\pi c < 1.4$ ,  $-0.5 < ka / 2\pi < 0.5$  mit  $\delta x = a/2$ .

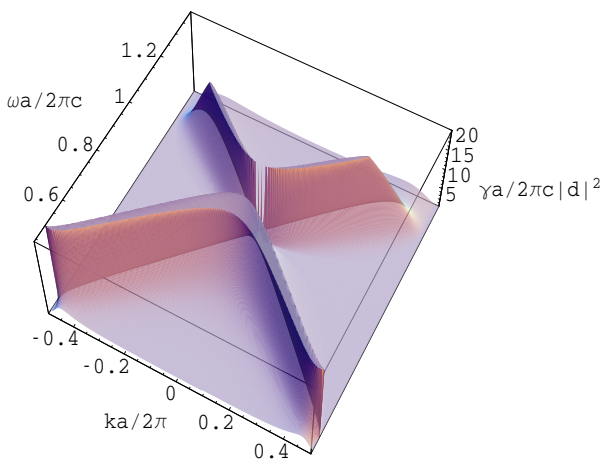


Abbildung 32: Wie Abb.30, jedoch im Intervall  $0.44 < \omega a / 2\pi c < 1.4$ ,  $-0.5 < ka / 2\pi < 0.5$ .

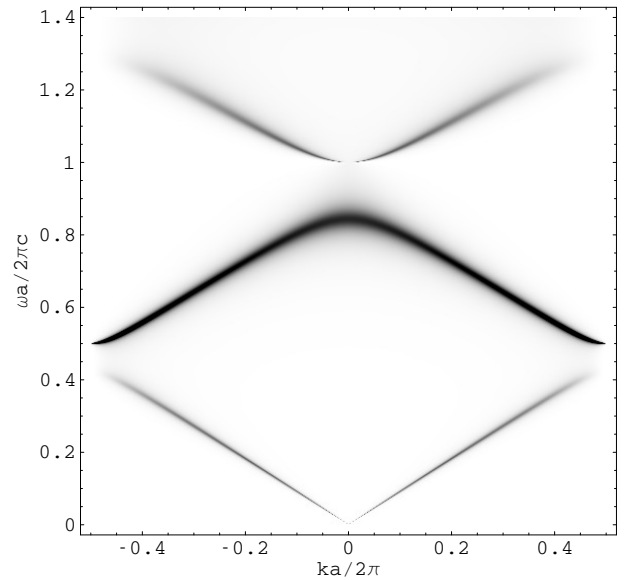


Abbildung 33: Wie Abb.31, allerdings werden die den unterschiedlichen Höhenlinien zugeordneten Werte der Zerfallsrate der Dipolkette in ein entsprechendes Dichteprofil übersetzt.

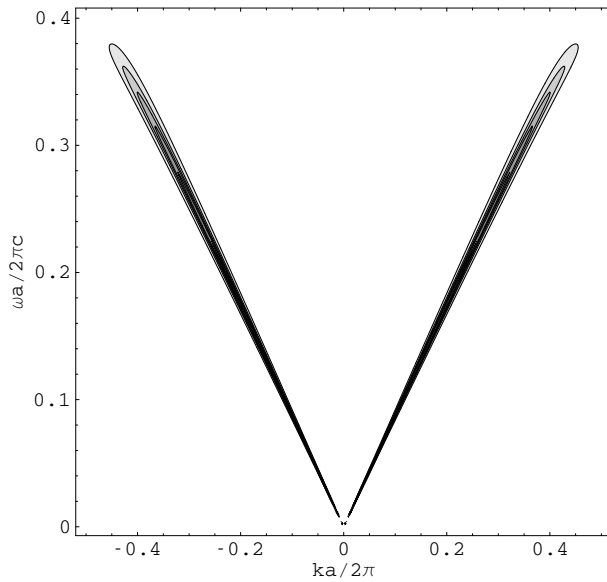


Abbildung 34: Höhenliniendiagramm für die Zerfallsrate der Dipolkette bei einer Polarisierbarkeit  $\alpha=0.3a+i0.05a$  im Intervall  $0 < \omega a/2\pi c < 0.4$ ,  $-0.5 < ka/2\pi < 0.5$  mit  $\delta x=a/2$ . In diesem Intervall liegt das erste Band einer Bandstruktur eines eindimensionalen Gitters aus Punktstreuern. In den Bändern mit ungerader Bandnummer scheint die Absorption einen weitaus geringeren Einfluß zu haben, lediglich in Richtung der oberen Bandkante tritt eine erkennbare Abweichung von der ursprünglichen Bandstruktur auf.

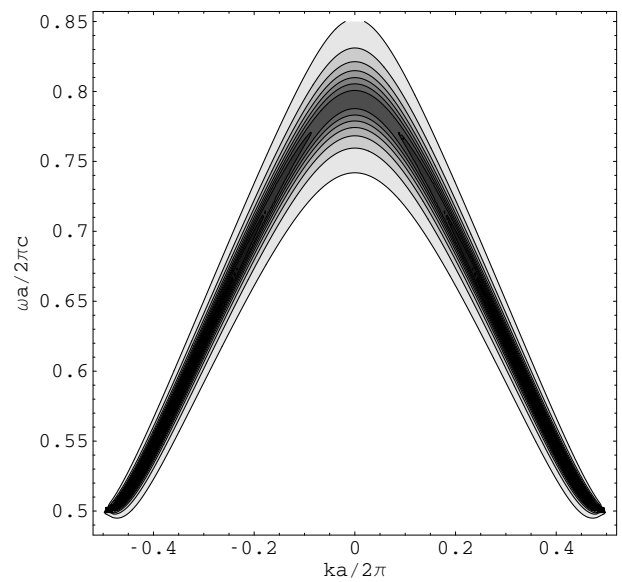


Abbildung 35: Höhenliniendiagramm für die Zerfallsrate der Dipolkette bei einer Polarisierbarkeit  $\alpha=0.3a+i0.05a$  im Intervall  $0.5 < \omega a/2\pi c < 0.85$ ,  $-0.5 < ka/2\pi < 0.5$  mit  $\delta x=a/2$ . Im Gegensatz zu Abb.34 wird damit das zweite Band einer entsprechenden Bandstruktur wiedergegeben. Absorption hat in diesem, wie auch grundsätzlich bei allen geradzahigen Bändern, einen verstärkten Einfluß. Besonders in der Nähe der oberen Bandkante wird die ursprüngliche Bandstruktur  $k_0(\omega_0)$  bzw.  $\omega_0(k_0)$  stark verbreitert.

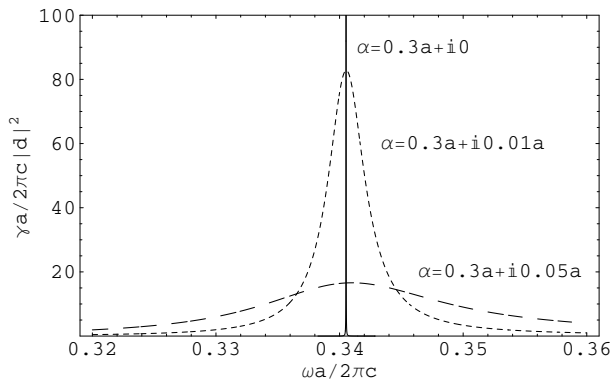


Abbildung 36: Zerfallsrate des kollektiven Dipols für  $k_0(\omega_0 + \delta\omega)a/2\pi = 0.4$  bei einer festen Polarisierbarkeit  $\alpha=0.3a+i0a$ ,  $\alpha=0.3a+i0.01a$  und  $\alpha=0.3a+i0.05a$ , wobei  $\omega_0$  auf das erste Band beschränkt bleibt, so daß man sich in der Nähe der oberen Bandkante befindet und die Dipole sich alle im Zentrum der Einheitszellen befinden. Bei fehlender Absorption verschwindet die Zerfallsrate im Unendlichen.

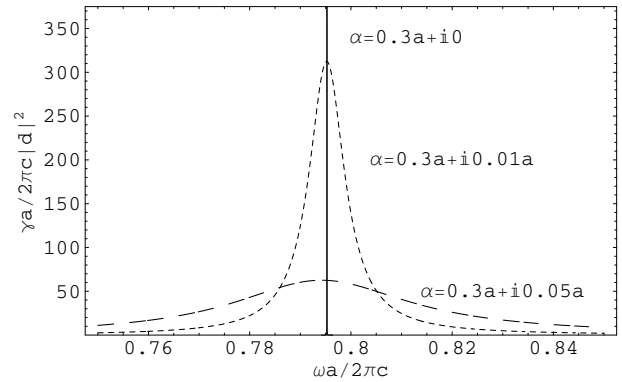


Abbildung 37: Wie Abb.36, jedoch mit einem festem  $k_0(\omega_0 + \delta\omega)a/2\pi=0$  und  $\omega_0$  im zweiten Band in der Nähe der oberen Bandkante. Die Zerfallsrate in den geradzahigen Bändern ist wesentlich größer gegenüber denen mit ungerader Bandnummer und besitzt im Vergleich dazu mit steigender Absorption auch eine größere Halbwertsbreite jedoch ein ähnliches Verbreitungsprofil.

## 9. ZUSAMMENFASSUNG

Das Strahlungsfeld in einem absorbierenden, periodischen Dielektrikum ist kanonisch quantisiert worden. Dabei wurde ein eindimensionales Modell mit punktförmigen Streuern betrachtet, deren Polarisierbarkeit den KRAMERS-KRONIG-Relationen gehorcht. Es wurde ein Quantisierungsverfahren nach KNÖLL, SCHEEL und WELSCH [KW98] verwendet, das als eine Ergänzung zum mikroskopischen HUTTNER-BARNETT-Schema [HB92] aufgefaßt werden kann und in dem auf der Basis der phänomenologischen MAXWELL-Gleichungen eine bosonische Rauschpolarisation als die Quelle des Feldes auftritt. Das Problem reduziert sich dabei auf die Bestimmung der klassischen GREENS-Funktion.

Die KRAMERS-KRONIG-Relationen der komplexen Polarisierbarkeit der Punktstreuer sichern die korrekte Verknüpfung zwischen Dispersion und Absorption. Der Punktstreuer ist dabei ein idealisiertes Modell, um periodische Hintergrundmedien, denen das Strahlungsfeld ausgesetzt ist, zu beschreiben. Er bedarf jedoch eines Kompromisses, um die entsprechenden Rauschquellen zu konstruieren. Es konnte gezeigt werden, daß der Punktstreuer dasselbe Streuverhalten wie eine dünne Potentialschwelle besitzt und damit die technischen Schwierigkeiten für den Fall eines absorptiven Punktstreuers überwunden werden können. An Hand dieses Beispiels konnte das Quantisierungsschema nach KNÖLL, SCHEEL und WELSCH auf periodische und absorbierende Strukturen angewendet werden.

Es ist bekannt, daß die Bestimmung der Modenstruktur für den Fall der Modenzerlegung des Strahlungsfeldes ein rein klassisches Problem darstellt. Mit Ausnahme des Vakuums ist eine zweckmäßige Modenzerlegung nur dann durchführbar, wenn mit einer reellen Polarisierbarkeit  $\alpha(\omega)$  die Absorption vernachlässigt werden kann. Aus den KRAMERS-KRONIG-Relationen wird klar, daß solch eine Annahme nur in bestimmten Intervallen  $\Delta\omega$  des Frequenzspektrums gerechtfertigt werden kann. Es wurde gezeigt, daß auch das quantisierte Strahlungsfeld in Anwesenheit der Punktstreuer in eben solchen Intervallen in *Quasimoden* entwickelt werden kann, wenn man neue *Quasioperatoren* als Erzeuger und Vernichter einführt. Die bosonischen Vertauschungsrelationen dieser Operatoren konnten bestätigt werden. Die allgemeine Vertauschungsrelation kanonisch konjugierter Variablen im Sinne der kanonischen Quantisierung kann für das elektrische Feld und das Vektorpotential beibehalten werden.

In der GREENS-Funktion sind sämtliche Informationen über die dispersiven und absorptiven Eigenschaften des Dielektrikums sowie über die räumliche Struktur enthalten. Die wesentlichen Merkmale werden dabei durch den Reflexionskoeffizienten nach BOEDECKER und HENKEL [BH03] bestimmt, der das Reflexionsverhalten an einem unendlich ausgedehnten Halbraum aus periodisch angeordneten Punktstreuern beschreibt. Mit Hilfe des Transfermatrixformalismus war es möglich einen allge-

meinen Zugang zum Reflexionsverhalten zunächst endlicher Strukturen zu erhalten. Die Ausdehnung auf den Halbraum mit Hilfe der Klassifizierung in Untergruppen der Transfermatrizen nach YONTE, MONZON und SANCHEZ-SOTO [YMSS<sup>+</sup>02], [YMSS01] ermöglichte es, den Reflexionskoeffizienten nach BOEDECKER und HENKEL auch geometrisch plausibel zu machen.

Inhomogene Medien liefern eine Umgebung, die die Vakuumfluktuationen stark beeinflusst. In periodischen, unendlich ausgedehnten Strukturen wird dieser Einfluß zum einen durch die Bandlücke erkennbar, in der der spontane Zerfall eines angeregten Atoms unterbunden ist. Zum anderen durch die Bandstruktur selbst, in der in der Nähe der Bandkanten der spontane Zerfall extrem beschleunigt werden kann. In FERMIs Goldener Regel ist die lokale Zustandsdichte der Zerfallsrate proportional, die im absorptionsfreien Fall aus der Modenzerlegung bestimmt werden kann. Für den absorptiven Fall kann man sich der Vorteile des Schemas nach KNÖLL, SCHEEL und WELSCH bedienen. Für die lokale Zustandsdichte in einem absorptiven Punktstreuermodell konnten die Ergebnisse nach [BH03] bestätigt werden, wobei vom Dissipations-Fluktuations-Theorem Gebrauch gemacht worden ist.

Ein wesentlicher Aspekt von periodischen Systemen ist die Translationssymmetrie, die im Fall unendlich ausgedehnter, verlustfreier Systeme auf eine ideale Bandstruktur führt. Mit Hilfe der Untergruppenklassifizierung kann im verlustfreien Fall die Geometrie der Anordnung indirekt mit der Bandstruktur verknüpft werden. Es konnte nachgewiesen werden, daß auch der einzelne Punktstreuer immer in einer dieser Untergruppen zu finden ist. Dabei besitzt die Bandstruktur der unendlich periodischen Anordnung dieser Streuer immer eine von der Polarisierbarkeit abhängige Bandkante und eine von der Polarisierbarkeit unabhängige Bandkante. Die Bandstruktur, die mit den verlustbehafteten Feldern einhergeht, ist eine doppelt komplexe. Alternativ zu dieser nur schwer zu interpretierenden Bandstruktur wurden die Feldfluktuationen selektiv nach reellen Frequenzen und Wellenzahlen sondiert. Es zeigt sich, daß Absorption besonders in der Nähe der Bandkanten die Bänder verbreitert. Die Ergebnisse, die mit Hilfe der lokalen Zustandsdichtefunktion gewonnen wurden, konnten dabei bestätigt werden.

### Danksagung

Für die freundliche Aufnahme in ihre Arbeitsgruppe möchte ich mich bei allen Mitgliedern der Arbeitsgruppe Quanten-Optik der Universität Potsdam unter der Leitung von Prof. Dr. Martin Wilkens recht herzlich bedanken. Ein besonderer Dank gilt vor allem Dr. Carsten Henkel und Geesche Boedecker, deren Ideen und Geduld in so manchen Diskussionen die Arbeit erst möglich gemacht haben. Des Weiteren bedanke ich mich bei Timo Felbinger für seinen Rat und seine Unterstützung bei technischen Problemen.

## Anhang A: ANHANG ZU 2

Der Hauptwert  $\mathcal{P}\left(\frac{1}{x}\right)$

Eine der wichtigen verallgemeinerten Funktionen oder auch Distributionen, die in der Quantentheorie eine Rolle spielen, ist der CAUCHYSche Hauptwert oder auch *Principalwert*. Man definiert:

$$\mathcal{P}\left(\frac{1}{x}\right) \stackrel{\text{def}}{=} \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{x}{x^2 + \varepsilon^2}, \quad (\text{A1})$$

d.h. der Limes  $\varepsilon \rightarrow 0$  der Integrale

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dx f(x) \frac{x}{x^2 + \varepsilon^2} \quad (\text{A2})$$

wird mit

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dx f(x) \mathcal{P}\left(\frac{1}{x}\right)$$

bezeichnet. Weil im Integral (A2) der Beitrag zwischen den Grenzen  $-\varepsilon$  und  $+\varepsilon$  mit  $\varepsilon$  verschwindet, ergibt sich:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dx f(x) \mathcal{P}\left(\frac{1}{x}\right) = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \left( \int_{-\infty}^{-\varepsilon} + \int_{+\varepsilon}^{+\infty} \right) \frac{f(x)}{x} dx.$$

$\mathcal{P}$  bedeutet also, daß bei der Integration die Singularität von  $1/x$  symmetrisch ausgeschlossen wird.

Die Identität

$$\frac{1}{x \pm i\varepsilon} = \frac{x}{x^2 + \varepsilon^2} \mp i \frac{\varepsilon}{x^2 + \varepsilon^2}, \quad (\varepsilon > 0)$$

führt wegen Gleichung (A1) und einer praktischen Definition der  $\delta$ -Funktion mit Hilfe der Folge von Glockenkurven,

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{1}{\pi} \frac{\varepsilon}{x^2 + \varepsilon^2} \stackrel{\text{def}}{=} \delta(x),$$

auf die Beziehung

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{1}{x \pm i\varepsilon} \stackrel{\text{def}}{=} \mathcal{P}\left(\frac{1}{x}\right) \mp i\pi\delta(x), \quad (\text{A3})$$

die in ihrer Gesamtheit auch als DIRAC-Identität bekannt ist.

## Überprüfen der Lösung (2.53)

Um zu zeigen, daß (2.53) die Fundamentallösung des Differentialoperators  $\hat{\mathbf{D}}$  aus (2.47) ist, sind vorab einige kurze Überlegungen zu verallgemeinerten Funktionen notwendig. Für

$$f(x) = |x|$$

aufgefaßt als *reguläre* Distribution  $T_f$  und  $\phi \in \mathcal{D}^{18}$  ergibt sich mit partieller Integration:

$$\begin{aligned} \langle \dot{T}_f, \phi \rangle &= -\langle T_f, \dot{\phi} \rangle \\ &= \int_{-\infty}^0 x \dot{\phi}(x) dx - \int_0^{+\infty} x \dot{\phi}(x) dx \\ &= \int_0^{+\infty} \phi(x) dx - \int_{-\infty}^0 \phi(x) dx \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} \text{sgn}(x) \phi(x) dx \\ &= \langle T_{\text{sgn}}, \phi \rangle. \end{aligned}$$

Für die Sprungfunktion

$$\text{sgn}(x) = \begin{cases} 1 & : x > 0 \\ -1 & : x < 0 \end{cases}$$

erhält man für die Differentiation:

$$\begin{aligned} \langle \dot{T}_{\text{sgn}}, \phi \rangle &= -\langle T_{\text{sgn}}, \dot{\phi} \rangle \\ &= \int_{-\infty}^0 \dot{\phi}(x) dx - \int_0^{+\infty} \dot{\phi}(x) dx \\ &= 2 \cdot \phi(0) \\ &= 2 \cdot \langle T_\delta, \phi \rangle. \end{aligned}$$

Mit diesen beiden Ableitungen verallgemeinerter Funktionen ergibt sich mit dem Differentialoperator  $\hat{\mathbf{D}}$  aus (2.47) angewandt auf die Lösung (2.53):

$$\hat{\mathbf{D}}G^+(x, x', \omega) = -\delta(x - x') \exp[i\frac{\omega}{c}n |x - x'|]. \quad (\text{A4})$$

Da

$$\delta(x - x') \exp[i\frac{\omega}{c}n |x - x'|] = 0, \quad x \neq x'$$

und

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dx \delta(x - x') \exp[i\frac{\omega}{c}n |x - x'|] = 1$$

stellt die rechte Seite von (A4) einen anderen Ausdruck für die  $\delta$ -Funktion dar. Damit erfüllt die GREENS-Funktion (2.53) die Differentialgleichung (2.47) und ist die Fundamentallösung des Differentialoperators  $\hat{\mathbf{D}}$ ,

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{D}}G^+(x, x', \omega) &= -\delta(x - x') \exp[i\frac{\omega}{c}n |x - x'|] \\ &\stackrel{\text{def}}{=} -\delta(x - x'). \end{aligned}$$

<sup>18</sup>  $\mathcal{D}$  Raum der Testfunktionen mit kompaktem Träger



Anhang B: ANHANG ZU 4

Reflexionskoeffizienten für den Halbraum

Einfache Gitter und andere periodische Strukturen wie Kristalle können ebenfalls wie alle homogenen und inhomogenen Medien makroskopisch nach ihren Fähigkeiten zur Reflexion, Transmission und Absorption klassifiziert werden.

Bei eindimensionalen, endlichen Strukturen sind zur Ermittlung dieser Größen nur die Amplituden am Anfang oder Ende der Struktur interessant. Hat man eine  $N$ -periodische Struktur mit einer festen Periode  $a$  und kennt ihre Transfermatrix, kann man die Struktur auf den linken oder rechten Halbraum ausdehnen und damit einen entsprechenden Reflexionskoeffizienten für den jeweiligen Halbraum bestimmen.

Nach 4.2 kann man im Fall verlustfreier Strukturen sich einen *Streuer* herausgreifen und dessen Potential unter Berücksichtigung der Periodizität mit Hilfe der Transfermatrix zu der gesamten Struktur fortsetzen. Dabei muß die Transfermatrix den nach (4.22), (4.23) und (4.24) verschiedenen Untergruppen zugeordnet werden. Hat die Transfermatrix  $\hat{\mathbf{T}}$  in einer speziellen Darstellung dieselbe Spur wie ein Element aus einer der drei Untergruppen (4.22), (4.23) und (4.24), so existiert immer eine Transformationsmatrix  $\hat{\mathbf{S}}$  aus  $SU(1,1)$ ,

$$\hat{\mathbf{S}} = \begin{pmatrix} S_{11} & S_{12} \\ S_{12}^* & S_{11}^* \end{pmatrix} \in SU(1,1),$$

so daß gilt:

$$\hat{\mathbf{S}}\hat{\mathbf{T}} = \hat{\mathcal{L}}(\phi)\hat{\mathbf{S}}, \quad (\text{B1})$$

$$\hat{\mathbf{S}}\hat{\mathbf{T}} = \hat{\mathcal{M}}(\rho)\hat{\mathbf{S}}, \quad (\text{B2})$$

$$\hat{\mathbf{S}}\hat{\mathbf{T}} = \hat{\mathcal{N}}(\nu)\hat{\mathbf{S}}. \quad (\text{B3})$$

Um die Matrix  $\hat{\mathbf{S}}$  der Ähnlichkeitstransformation nach

$$\hat{\mathbf{T}}^N = \begin{pmatrix} |S_{11}|^2 e^{i\phi N} + e^{-i\phi N} (S_{12}^*)^2 & 2S_{11}^* \Re[e^{i\phi N} S_{12}] \\ 2S_{11} \Re[e^{i\phi N} S_{12}] & |S_{11}|^2 e^{-i\phi N} + e^{i\phi N} (S_{12})^2 \end{pmatrix}.$$

Da die Matrix  $\hat{\mathbf{S}} \in SU(1,1)$ , bleibt die Spur mit

$$\text{Tr}[\hat{\mathbf{T}}^N] = \text{Tr}[\hat{\mathcal{L}}(N\phi)] = 2 \cos(\phi N) \cdot \det \hat{\mathbf{S}}$$

erhalten. Wenn sich das endliche System immer rechts relativ zu den einlaufenden Amplituden befindet, bestimmt man nach (4.5) den Reflexionskoeffizienten der Struktur

(B1), (B2) oder (B3) mit einer Matrix  $\hat{\mathbf{T}} \in SU(1,1)$  zu bestimmen, erhält man ein Gleichungssystem aus zwei Gleichungen und vier Unbekannten, zwei Phasen und zwei Beträge der komplexen Zahlen  $S_{11}$ ,  $S_{12}$ . Die Lösung wird durch komplexe Konjugation von  $S_{11}$  und  $S_{12}$  vervollständigt.

Die Beträge werden durch die Determinante bestimmt. Die Phasen aber sind frei wählbar. Aus der Menge der Transformationsmatrizen  $\{\hat{\mathbf{S}}\}$  ist es daher o.B.d.A. legitim für  $\hat{\mathbf{S}}$  eine Transfermatrix eines symmetrischen Potentials nach (4.17) zu verwenden und sich ihrer praktischen Eigenschaften bei der Berechnung der Reflexionskoeffizienten zu bedienen. Eine Phase wird dabei schon festgelegt und die Inverse kann einfach nach (4.7) gebildet werden,

$$S_{12} \in i\mathbb{R} \quad \wedge \quad \hat{\mathbf{S}}\hat{\mathbf{S}} = 1.$$

Konzentriert man sich zunächst auf Elemente der Gruppe  $\{\hat{\mathcal{L}}(\phi)\}$  mit  $\hat{\mathcal{L}}(\phi)$  aus (4.22), so muß Spurerhaltung vorausgesetzt werden,

$$\text{Tr}[\hat{\mathcal{L}}(\phi)]^2 = \text{Tr}[\hat{\mathbf{T}}]^2 = 4 \cos^2(\phi) = 4 [\Re(T_{11})]^2 < 4.$$

Für ein  $N$ -periodisches System ergibt sich mit der Gruppenverknüpfung nach (4.25) für den Streuer der gesamten Struktur nach  $N$  Perioden:

$$\hat{\mathbf{T}}^N = \hat{\mathbf{S}}^{-1} [\hat{\mathcal{L}}(\phi)]^N \hat{\mathbf{S}} = \hat{\mathbf{S}}^{-1} \hat{\mathcal{L}}(N\phi) \hat{\mathbf{S}}.$$

Diese Transfermatrix hängt indirekt von weiteren Parametern ab und ist das Ergebnis einer Skalierung des Parameters  $\phi$  der Untergruppe  $\{\hat{\mathcal{L}}(\phi)\}$ .

Die Transformationsmatrix  $\hat{\mathbf{S}}$  läßt sich nach (B1) bestimmen und es ergibt sich:

zu

$$r_N = \frac{-2S_{11} \Re[e^{i\phi N} S_{12}] e^{i\phi N}}{|S_{11}|^2 + (S_{12})^2 e^{2i\phi N}}. \quad (\text{B4})$$

Da auch  $\hat{\mathbf{T}}^N \in SU(1,1)$  mit  $\det \hat{\mathbf{T}}^N = 1$ , kann man sich die Determinante von  $\hat{\mathbf{T}}^N$  zu Hilfe nehmen und den Betrag

des Reflexionskoeffizienten mit

$$\begin{aligned} |r_N|^2 &= \frac{4 |S_{11}|^2 |S_{12}|^2 \sin^2(\phi N)}{|S_{11}|^4 + |S_{12}|^4 - 2\Re[S_{12}^2 e^{2i\phi N}]} \\ &= \frac{4 |S_{11}|^2 |S_{12}|^2 \sin^2(\phi N)}{\det \hat{\mathbf{T}}^N - 4 |S_{11}|^2 |S_{12}|^2 \sin^2(\phi N)} \\ &= \frac{4 |S_{11}|^2 |S_{12}|^2 \sin^2(\phi N)}{1 - 4 |S_{11}|^2 |S_{12}|^2 \sin^2(\phi N)} \end{aligned}$$

vereinfachen. Der Reflexionskoeffizient oszilliert also zwischen null und  $2 |S_{11}| |S_{12}| / \sqrt{1 - 4 |S_{11}|^2 |S_{12}|^2}$  in Abhängigkeit von der Periodenanzahl  $N$ . Wie zu erwarten war, liegt der Reflexionskoeffizient immer im oder auf dem Einheitskreis,

$$0 \leq |r_N| \leq 1 .$$

Für eine periodische Anordnung von Streuern mit einem Translationsoperator  $\hat{\mathbf{T}}$  mit  $\text{Tr}[\hat{\mathbf{T}}]^2 < 4$  befindet man sich daher nach 4.3 in der Tat in einem erlaubten Band der Bandstruktur des Mediums. Will man die periodische Anordnung auf den rechten Halbraum ausdehnen ( $N \rightarrow \infty$ ), muß man einen anderen Zugang zum Reflexionskoeffizienten des gesamten Halbraumes finden. Bei einem genaueren Blick auf (B4) erkennt das geschulte Auge sofort die Ähnlichkeit zu dem nach [BW80] und [BH03] bereits bekannten FABRY-PEROT-Nenner im Ausdruck des Reflexionskoeffizienten periodisch geschichteter Medien wieder,

$$r_{N,FP} \sim \frac{1}{1 - r_i^2 e^{2i\phi N}} = \frac{1}{1 - \left(\frac{S_{12}}{|S_{11}|}\right)^2 e^{2i\phi N}} .$$

Dabei ist  $r_i$  der innere Reflexionskoeffizient am linken Ende der endlichen Struktur relativ zu den einfallenden Amplituden. Daraus wird ersichtlich, daß der Reflexionskoeffizient dem Verhältnis der Einträge  $S_{11}$  und  $S_{12}$  der Transformationsmatrix  $\hat{\mathbf{S}}$  zugeordnet werden kann. Tatsächlich ist die Matrix  $\hat{\mathbf{S}} \in \text{SU}(1,1)$  ja eine Transfermatrix, welche wie alle Transfermatrizen Feldamplituden abbildet. Nach [BH03] ist es daher möglich mit der *Transfermatrix*  $\hat{\mathbf{S}}$  die Amplituden außerhalb mit den Amplituden innerhalb der periodischen Struktur zu verbinden. Für eine von links einlaufende Amplitude folgt für den Reflexionskoeffizienten  $\mathcal{R}$  des rechten Halbraumes und den Transmissionskoeffizienten  $t$  für eine entsprechende Transmission in das Medium:

$$\begin{pmatrix} t \\ 0 \end{pmatrix} = \hat{\mathbf{S}} \begin{pmatrix} 1 \\ \mathcal{R} \end{pmatrix} .$$

Aus (B1) ergibt sich mit der Transfermatrix  $\hat{\mathbf{T}}$ :

$$\frac{S_{12}}{S_{11}} = \frac{e^{i\phi} - T_{11}}{(T_{12})^*} ,$$

so daß man letztendlich für den Reflexionskoeffizienten des rechten Halbraumes erhält:

$$\begin{aligned} \mathcal{R} &= -\frac{(S_{12})^*}{(S_{11})^*} = \frac{(T_{11})^* - e^{-i\phi}}{T_{12}} \\ &= \frac{e^{i\phi} - T_{11}}{T_{12}} . \end{aligned} \quad (\text{B5})$$

In [BH03] wird der Reflexionskoeffizient  $\mathcal{R}$  speziell in der BLOCH-Basis ermittelt. Dazu wird die Matrix  $\hat{\mathbf{T}}$  in eben dieser Basis diagonalisiert. Überträgt man obige Überlegungen darauf, so kann dem Parameter  $\phi$  der Gruppe  $\{\hat{\mathcal{L}}(\phi)\}$  der *relative* Pseudoimpuls  $k$  zugeordnet werden,

$$\{\hat{\mathcal{L}}(\phi)\} \longrightarrow \{\hat{\mathcal{L}}(k)\} ,$$

der durch die Periode  $a$  entsprechend skaliert wird. Die Transfermatrix  $\hat{\mathbf{S}}$  verbindet dann die ebenen Wellen außerhalb mit den BLOCH-Wellen innerhalb der Struktur.

Ganz anders verhält es sich, wenn es sich für  $\hat{\mathbf{T}}$  um ein Element aus der Gruppe  $\{\hat{\mathcal{M}}(\rho)\}$  handelt. Mit (B2) wird gleichzeitig Spurerhaltung vorausgesetzt,

$$\text{Tr} [\hat{\mathcal{M}}(\rho)]^2 = \text{Tr} [\hat{\mathbf{T}}]^2 = 4 \cosh^2(\rho) = 4 [\Re(T_{11})]^2 > 4 .$$

Die Transfermatrix der gesamten  $N$ -periodischen, endlichen Struktur kann wieder durch Skalierung des Gruppenparameters  $\rho$  mit der Periodenanzahl  $N$  ermittelt werden,

$$\hat{\mathbf{T}}^N = \hat{\mathbf{S}}^{-1} [\hat{\mathcal{M}}(\rho)]^N \hat{\mathbf{S}} = \hat{\mathbf{S}}^{-1} \hat{\mathcal{M}}(N\rho) \hat{\mathbf{S}} ,$$

dabei ergibt sich für die Transformationsmatrix  $\hat{\mathbf{S}}$  aus (B2):

$$S_{11}T_{11} + S_{12}(T_{12})^* = \cosh(\rho)S_{11} + i \sinh(\rho)(S_{12})^* , \quad (\text{B6})$$

$$S_{11}T_{12} + S_{12}(T_{11})^* = \cosh(\rho)S_{12} + i \sinh(\rho)(S_{11})^* . \quad (\text{B7})$$

Man erhält aus

$$(S_{12})^*T_{11} + (S_{11})^*(T_{12})^* = \cosh(\rho)(S_{12})^* - i \sinh(\rho)S_{11}$$

mit (B6) und (B7):

$$\frac{S_{12}}{S_{11}} = \frac{2T_{11} \cosh(\rho) - (T_{11})^2 - |T_{12}|^2 - 1}{2(T_{12})^* \Re(T_{11}) - 2(T_{12})^* \cosh(\rho)} . \quad (\text{B8})$$

Die Eins in (B8) ersetzt man durch die Determinante der Transfermatrix  $\hat{\mathbf{T}}$ ,

$$\det \hat{\mathbf{T}} = |T_{11}|^2 - |T_{12}|^2 = 1$$

und berücksichtigt die Spurerhaltung mit

$$\cosh(\rho) + \varepsilon \stackrel{\varepsilon \rightarrow 0}{=} \Re(T_{11}) ,$$

dann muß die Transformationsmatrix  $\hat{\mathbf{S}}$  die Bedingung

$$\frac{S_{12}}{S_{11}} = -\frac{T_{11}}{(T_{12})^*} \quad (\text{B9})$$

erfüllen. Ist (B9) für eine *Transfermatrix*  $\hat{\mathbf{S}}$  eines symmetrischen Potentials erfüllt, so ergibt sich mit der Transformationsmatrix  $\hat{\mathbf{T}}$  der Streuer  $\hat{\mathbf{T}}^N$ ,

$$\hat{\mathbf{T}}^N = \begin{pmatrix} \cosh(N\rho) + 2 \sinh(N\rho) (S_{12})^* \Im(S_{11}) & -i \sinh(N\rho) [ |S_{12}|^2 - [(S_{11})^*]^2 ] \\ i \sinh(N\rho) [ |S_{12}|^2 - (S_{11})^2 ] & \cosh(N\rho) + 2 \sinh(N\rho) S_{12} \Im(S_{11}) \end{pmatrix}. \quad (\text{B10})$$

Da es sich bei der Matrix  $\hat{\mathbf{S}}$  nach (4.17) um eine Transfermatrix eines symmetrischen Potentials mit  $S_{12} \in i\mathbb{R}$  handelt, kann man leicht nachprüfen, daß die Spur auch hier erhalten bleibt,

$$\begin{aligned} \text{Tr} [\hat{\mathbf{T}}^N] &= 2 \cosh(N\rho) + 4 \sinh(N\rho) \Re(S_{12}) \Im(S_{11}) \\ &= \text{Tr} [\hat{\mathcal{M}}(N\rho)] = 2 \cosh(N\rho). \end{aligned}$$

Weil der Reflexionskoeffizient in (B10) nach (4.5) mit  $\tanh(N\rho) \xrightarrow{N \rightarrow \infty} 1$  für eine wachsende Anzahl von Perioden unabhängig von der Periodenanzahl wird, ergibt

sich für den Reflexionskoeffizienten  $\mathcal{R}$  des rechten Halbraumes:

$$\mathcal{R} = i \frac{|S_{12}|^2 - (S_{11})^2}{1 + 2S_{12} \Im(S_{11})}$$

oder anders für das Betragsquadrat des Koeffizienten:

$$|\mathcal{R}|^2 = \frac{[ |S_{12}|^2 - (S_{11})^2 ] [ |S_{12}|^2 - [(S_{11})^*]^2 ]}{1 + 4(S_{12})^2 [\Im(S_{11})]^2}.$$

Da  $\hat{\mathbf{T}}^N \in \text{SU}(1,1)$ , kann man wieder die Determinante,

$$\det \hat{\mathbf{T}}^N = \cosh^2(N\rho) + 4 \sinh^2(N\rho) (S_{12})^2 [\Im(S_{11})]^2 - \sinh^2(N\rho) [ |S_{12}|^2 - (S_{11})^2 ] [ |S_{12}|^2 - [(S_{11})^*]^2 ] \stackrel{!}{=} 1,$$

zur weiteren Auswertung heranziehen und erhält einen Reflexionskoeffizienten mit Betrag eins,  $|\mathcal{R}|^2 = 1$ . In Übereinstimmung mit 4.3 befindet man sich also in der Bandlücke. Eine Ausbreitung von Wellen innerhalb der Struktur wird unterbunden.

Für Elemente von  $\hat{\mathbf{T}}$  mit einem Spurquadrat gleich vier befindet man sich nach 4.3 auf der Bandkante. Man kann diese dann der Untergruppe  $\{\hat{\mathcal{N}}(\nu)\}$  zuordnen,

$$\text{Tr} [\hat{\mathcal{N}}(\rho)]^2 = \text{Tr} [\hat{\mathbf{T}}]^2 = 4.$$

Das Verhalten auf der Bandkante kann genauso wie bei den anderen zwei Fällen wieder durch Skalierung des Parameters  $\nu$  mit

$$\hat{\mathbf{T}}^N = \hat{\mathbf{S}}^{-1} [\hat{\mathcal{N}}(\nu)]^N \hat{\mathbf{S}} = \hat{\mathbf{S}}^{-1} \hat{\mathcal{N}}(N\nu) \hat{\mathbf{S}}$$

untersucht werden. Für die Transformationsmatrix  $\hat{\mathbf{S}}$  in (B3) ergibt sich:

$$S_{11} T_{11} + S_{12} (T_{12})^* = (1 - \nu) S_{11} + \nu (S_{12})^*, \quad (\text{B11})$$

$$S_{11} T_{12} + S_{12} (T_{11})^* = (1 - \nu) S_{12} + \nu (S_{11})^*. \quad (\text{B12})$$

Aus

$$(S_{11})^* (T_{12})^* + (S_{12})^* T_{11} = (1 + \nu) (S_{12})^* + \nu S_{11}$$

erhält man erneut mit Hilfe von (B11) und (B12):

$$\frac{S_{12}}{S_{11}} = \frac{T_{11} [2\Re(T_{11}) - 2]}{(T_{12})^* [2 - 2\Re(T_{11})]}$$

oder

$$\frac{S_{12}}{S_{11}} = -\frac{T_{11}}{(T_{12})^*}. \quad (\text{B13})$$

Mit der nach (B3) bestimmten Transformationsmatrix  $\hat{\mathbf{S}}$  und den Abkürzungen

$$\sigma^- = (1 - iN\nu) \quad \wedge \quad \sigma^+ = (1 + iN\nu)$$

ermittelt man die Transfermatrix  $\hat{\mathbf{T}}^N$  der gesamten periodischen Struktur zu

$$\hat{\mathbf{T}}^N = \begin{pmatrix} \sigma^- |S_{11}|^2 + \sigma^+ [(S_{12})^*]^2 + 2N\nu \Re(S_{11})(S_{12})^* & (S_{11})^* [\sigma^- S_{12} + \sigma^+ (S_{12})^*] + N\nu \left[ [(S_{11})^*]^2 + |S_{12}|^2 \right] \\ S_{11} [\sigma^+ (S_{12})^* + \sigma^- S_{12}] + N\nu \left[ (S_{11})^2 + |S_{12}|^2 \right] & \sigma^+ |S_{11}|^2 + \sigma^- (S_{12})^2 + 2N\nu \Re(S_{11})S_{12} \end{pmatrix}. \quad (\text{B14})$$

Auch hier läßt sich relativ leicht nachprüfen, daß die Spur wieder erhalten bleibt,

$$\text{Tr} \left[ \hat{\mathbf{T}}^N \right] = \text{Tr} \left[ \hat{\mathcal{N}}(N\nu) \right] = \sigma^+ + \sigma^- = 2.$$

Die Auswertung des Reflexionskoeffizienten ist allerdings algebraisch etwas aufwendiger. Erweitert man die Transfermatrix (B14) auf den rechten Halbraum, so wird der Reflexionskoeffizient wieder unabhängig von der Periodenanzahl  $N$ ,

$$\mathcal{R} \stackrel{N \rightarrow \infty}{=} - \frac{2S_{11}\Im(S_{12}) + (S_{11})^2 + |S_{12}|^2}{2\Re(S_{11})S_{12} + i[|S_{11}|^2 - S_{12}^2]}.$$

Bestimmt man für (B14) wieder die Determinante und setzt voraus, daß  $\hat{\mathbf{T}}^N \in \text{SU}(1,1)$  mit  $\det \hat{\mathbf{T}}^N = 1$ , so kann das Betragsquadrat des Reflexionskoeffizienten nach entsprechend langer Rechnung umgeformt werden zu

$$|\mathcal{R}|^2 \rightarrow \frac{F(S_{11}, S_{12})}{\frac{1}{N^2} + F(S_{11}, S_{12})}.$$

Der Grenzübergang  $N \rightarrow \infty$  ergibt:

$$|\mathcal{R}|^2 \rightarrow 1 - 0.$$

Zusammenfassend lassen sich daher durch die Spurkriterien nach 4.3 nicht nur einfach die Streuer klassifizieren, sondern man erhält auch einen direkten Zugang zu den drei generellen Reflexionsverhalten der periodischen Struktur, je nachdem, ob man sich auf der Bandkante, innerhalb oder außerhalb der Bandlücke befindet. Dabei gilt es zwischen der Transfermatrix eines einzelnen Streuers und der Transfermatrix zu unterscheiden, die neben dem Potential des einzelnen Streuers auch die Periodizität *einfach* berücksichtigt und als Translationsoperator im Gitter verwendet werden kann.

## Anhang C: ANHANG ZU 6

### Distributionen und andere Dinge

In physikalischen Anwendungen sind oft Ausdrücke der Form  $\langle T_f, \phi \rangle$  auszuwerten, in denen  $\phi$  nicht notwendigerweise eine Testfunktion aus  $\mathcal{D}^{18}$  ist. Häufig lassen sich Distributionen als stetige, lineare Funktionale auf einer größeren Klasse von Funktionen als auf  $\mathcal{D}$  definieren.  $\mathcal{D}$  ist dabei eine Menge von Funktionen, auf der alle solchen linearen Funktionale gemeinsam operieren. Zum

Beispiel läßt sich die DIRAC-Distribution  $\langle \delta, \phi \rangle$  für alle  $\phi$  definieren, die um den Nullpunkt stetig sind. Reguläre Distributionen  $\langle T_f, \phi \rangle$  lassen sich fortsetzen auf alle  $\phi$ , für welche das Produkt  $f\phi$  integrierbar ist. Durch Einschränkung auf den gemeinsamen Definitionsbereich  $\mathcal{D}$  stellt die Distributionentheorie ein Mittel zur Verfügung, das für alle solche Funktionale gleichermaßen gilt. Aufgrund der Eigenschaften der  $\delta$ -Funktion ist auch der DIRAC-Kamm

$$\sum_m \delta(x - ma)$$

eine *singuläre* Distribution, da er keine lokal integrierbare Funktion darstellt. Betrachtet man die beiden Funktionale

$$\langle \mathfrak{D}_k, \phi \rangle = \int_{\mathbb{R}} dx \phi(x) \sqrt{\sum_{m=-k}^k \delta(x - ma)}$$

und

$$\langle \mathfrak{D}, \phi \rangle = \sum_m \int_{\mathbb{R}} dx \phi(x) \sqrt{\delta(x - ma)},$$

so ist zunächst einmal nicht klar, inwieweit sie mit dem Begriff einer Distribution vereinbar sind und ob sie überhaupt existieren, da nicht sichergestellt werden kann, daß das jeweilige Funktional für jedes  $\phi \in \mathcal{D}$  auch vorhanden ist.

Obwohl die Wurzelfunktion keine Linearform ist, sind zwei durch die Funktionale  $\mathfrak{D}_\infty$  und  $\mathfrak{D}$  dargestellten Werte  $\langle \mathfrak{D}_\infty, \phi \rangle$  und  $\langle \mathfrak{D}, \phi \rangle$  der gleichen physikalischen Messgröße bei der Messung mit derselben Gewichtsfunktion  $\phi \in \mathcal{D}$  identisch, wenn man dabei ihre Existenz voraussetzt. Dazu überlege man sich, daß für jedes  $x=x_0$  ein  $m_0$  existiert, so daß

$$\begin{aligned} \sqrt{\sum_m \delta(x_0 - ma)} &= \sqrt{\delta(x_0 - m_0 a)} \\ &= \sum_m \sqrt{\delta(x_0 - ma)} \end{aligned}$$

gilt. Die durch die Funktionale  $\mathfrak{D}_k$  verallgemeinerten Funktionenfolgen  $\mathfrak{D}_k(x)$  erfüllen damit die Kriterien der *punktweisen* Konvergenz in  $x$ . Insbesondere gilt für eine

periodische Funktion  $\phi \in \mathcal{D}$  mit  $\phi(x) = \phi(x + ma)$ :

$$\begin{aligned} \langle \mathfrak{D}_\infty - \mathfrak{D}, \phi \rangle &= \lim_{k \rightarrow \infty} \int_{\mathbb{R}} dx \phi(x) [\mathfrak{D}_k(x) - \mathfrak{D}(x)] \\ &= \sum_m \int_{\text{WS}} dx_m \phi(x_m) [\mathfrak{D}_\infty(x_m) - \mathfrak{D}(x_m)] \\ &= 0, \end{aligned}$$

wobei man im Ortsraum entsprechend über die jeweilige WIGNER-SEITZ-Zelle zu integrieren hat. In Bezug auf den DIRAC-Kamm verhält sich die Wurzelfunktion also durchaus wie eine Linearform. Was bleibt, ist die Bedeutung der Verknüpfung der Wurzelfunktion mit der DIRAC-Distribution zu klären,

$$\langle \sqrt{\delta}, \phi \rangle = \int dx \phi(x) \sqrt{\delta(x)}. \quad (\text{C1})$$

Zu jeder Distribution gibt es eine Folge  $f_n$ ,  $n \in \mathbb{N}$ , unendlich oft differenzierbarer Funktionen, so daß für jede Testfunktion  $\phi \in \mathcal{D}$  gilt:

$$\langle T_f, \phi \rangle = \lim_{n \rightarrow \infty} \int_{\mathbb{R}} dx f_n(x) \phi(x).$$

Die Funktionen  $f_n$  können dabei sogar so gewählt werden, daß sie beschränkte Träger besitzen, also Testfunktionen sind. Das Funktional  $T_f$  ist dabei der *distributionelle* Limes. Bekanntlich ist auch der  $\delta$ -Impuls ein Limes und zwar im allgemeinen Sinn bzw. nicht im Sinn von punktweiser Konvergenz einer Funktionenfolge. Die mit einer Testfunktion  $\phi \in \mathcal{D}$  gewichteten Mittel der  $f_n$  konvergieren dann gegen eine reelle Zahl.

Neben den vielen Möglichkeiten die DIRAC-Distribution als Limes zu formulieren ist die Einfachste durch die Rechteckfunktion

$$f_\varepsilon = \begin{cases} \frac{1}{\varepsilon} & : |x| < \frac{\varepsilon}{2} \\ 0 & : |x| > \frac{\varepsilon}{2} \end{cases}$$

gegeben, wodurch sich das Funktional (C1) definieren läßt zu

$$\langle \sqrt{\delta}, \phi \rangle = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \int_{-\varepsilon/2}^{\varepsilon/2} dx \phi(x) \frac{1}{\sqrt{\varepsilon}}$$

oder etwas umgeformt mit  $x = \tilde{x}\varepsilon$ ,

$$\langle \sqrt{\delta}, \phi \rangle = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \int_{-1/2}^{1/2} d\tilde{x} \phi(\varepsilon\tilde{x}) \sqrt{\varepsilon}. \quad (\text{C2})$$

Damit man den Limes unter dem Integral ausführen kann, muß das Integral *gleichmäßig* konvergent sein. Ist  $\phi$  eine beschränkte Funktion für alle  $\tilde{x}$  und alle  $\varepsilon$ , dann gilt für den Betrag des Integranden:

$$|\phi(\varepsilon\tilde{x}) \sqrt{\varepsilon}| \leq M \sqrt{\varepsilon}$$

mit  $\tilde{x}\varepsilon \in [-1/2, 1/2]$ . Weil außerdem das Integral über die ausschließlich positive Funktion  $\sqrt{\varepsilon}$  existiert, ist zwar die gleichmäßige Konvergenz des Integrals (C2) gewährleistet, das Integral selbst aber verschwindet mit

$$\left| \int_{-1/2}^{1/2} d\tilde{x} \phi(\varepsilon\tilde{x}) \sqrt{\varepsilon} \right| < \int_{-1/2}^{1/2} d\tilde{x} |\phi(\varepsilon\tilde{x}) \sqrt{\varepsilon}|$$

trivialer Weise im Limes für jede in  $x$  und  $\varepsilon$  beschränkte Funktion  $\phi \in \mathcal{D}$  und  $\phi \notin \mathcal{D}$ , unabhängig davon ob  $\phi \notin \mathcal{D}$  eine stetige Funktion ist oder nicht.

Damit der Grenzwert nicht verschwindet, muß  $\phi$  eine beschränkte Funktion in  $x$  im Intervall  $x \in [-\varepsilon/2, \varepsilon/2]$  bleiben, so daß mit

$$|\phi(\varepsilon\tilde{x}) \sqrt{\varepsilon}| \leq M(\varepsilon) \sqrt{\varepsilon}$$

eine obere Schranke  $M(\varepsilon)$  für jedes  $\varepsilon > 0$  existiert. Hier liegt auch der Hauptunterschied zur DIRAC-Distribution. In (C2) verschwindet mit  $\sqrt{\delta} \rightarrow \delta$  in diesem Fall die Funktion  $\sqrt{\varepsilon}$ . Die einzige Bedingung, die man zu fordern hat, ist die allgemeine Beschränktheit von  $\phi$ . Wenn  $\phi$  zudem noch stetig ist, erhält man nach dem Limes das bekannte Resultat

$$\langle \delta, \phi \rangle = \phi(0).$$

Man kann die Existenz des Grenzwertes (C2) nicht beweisen, allenfalls nur für eine bestimmte Klasse von Funktionen  $\phi$  voraussetzen. Aufgrund dessen ist es auch nicht möglich die Funktionale  $\mathfrak{D}_k$  und  $\mathfrak{D}$  von vornherein im *klassischen* Sinn als eine Distribution aufzufassen. Was bleibt, ist der Grenzwertbegriff, auf den  $\mathfrak{D}_k$  und  $\mathfrak{D}$  jederzeit abgewälzt werden können.

### Zum Dissipations-Fluktuations-Theorem

Um die Vertauschungsrelationen (6.18) und (6.19) zu vereinfachen, kann man sich der Eigenschaft (6.11) der GREENS-Funktion bedienen,

$$G(x, \tilde{x}, \omega) = G(\tilde{x}, x, \omega),$$

wodurch sich aufgrund der Austauschsymmetrie die Bestimmungsgleichung (6.10) der GREENS-Funktion auch auf die Form

$$\partial_{\tilde{x}}^2 G(x, \tilde{x}, \omega) + \omega^2 \epsilon(\tilde{x}, \omega) G(x, \tilde{x}, \omega) = -\delta(x - \tilde{x})$$

bringen läßt. Formuliert man diese Differentialgleichung für  $G(x', \tilde{x}, \omega)$  und multipliziert mit  $G^*(x, \tilde{x}, \omega)$ , kann man wieder über  $\tilde{x}$  in  $\mathbb{R}$  integrieren. Mit der Dielektrizitätsfunktion (5.1) für das Modell aus Punktstreuern brechen die Integrale über die Reihe von  $\delta$ -Funktionen zusammen und man erhält:

$$\begin{aligned} \int_{\mathbb{R}} d\tilde{x} G^*(x, \tilde{x}, \omega) \partial_{\tilde{x}}^2 G(x', \tilde{x}, \omega) + \omega^2 \int_{\mathbb{R}} d\tilde{x} G^*(x, \tilde{x}, \omega) G(x', \tilde{x}, \omega) \\ + \omega^2 \alpha(\omega) \sum_m G_{\text{eff}}^*(x, ma, \omega) G_{\text{eff}}(x', ma, \omega) = -G^*(x, x', \omega) . \end{aligned}$$

Wenn man  $\lim_{|\tilde{x}| \rightarrow \infty} G^*(x, \tilde{x}, \omega) = 0$  berücksichtigt, folgt nach partieller Integration:

$$\begin{aligned} \omega^2 \alpha(\omega) \sum_m G_{\text{eff}}^*(x, ma, \omega) G_{\text{eff}}(x', ma, \omega) = \int_{\mathbb{R}} d\tilde{x} \partial_{\tilde{x}} G^*(x, \tilde{x}, \omega) \partial_{\tilde{x}} G(x', \tilde{x}, \omega) \\ - \omega^2 \int_{\mathbb{R}} d\tilde{x} G^*(x, \tilde{x}, \omega) G(x', \tilde{x}, \omega) - G^*(x, x', \omega) . \end{aligned}$$

Durch Subtraktion des komplex konjugierten Ergebnisses erhält man nach Austausch von  $x$  durch  $x'$ :

$$\begin{aligned} \omega^2 \Im [\alpha(\omega)] \sum_m G_{\text{eff}}^*(x, ma, \omega) G_{\text{eff}}(x', ma, \omega) &= \frac{i}{2} [G^*(x, x', \omega) - G(x', x, \omega)] \\ &= \frac{i}{2} [G(x', x, -\omega) - G(x', x, \omega)] \quad (\text{C3}) \\ &= \Im [G(x', x, \omega)] . \quad (\text{C4}) \end{aligned}$$

Für (C3) ist dabei wieder auf (6.12) zurückgegriffen worden. Der Ausdruck (C4) ist reell, damit verschwindet der Kommutator (6.18),

$$\begin{aligned} [\hat{\mathbf{E}}(x), \hat{\mathbf{E}}(x')] &= 0 , \\ [\hat{\mathbf{A}}(x), \hat{\mathbf{E}}(x')] &= \frac{1}{\pi} \int_0^\infty d\omega \omega [G^*(x', x, \omega) - G(x', x, \omega)] \\ &= -\frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^\infty d\omega \omega G(x', x, \omega) \\ &= -i \frac{2}{\pi} \int_0^\infty d\omega \omega \Im [G(x', x, \omega)] . \end{aligned}$$

Der Kommutator in (6.19) ergibt sich dabei aus (C3). Aus (C4) kann man zudem die für weitere Anwendungen wichtige Beziehung

$$\omega^2 \Im [\alpha(\omega)] \sum_m |G_{\text{eff}}(x, ma, \omega)|^2 = \Im [G(x, x, \omega)] \quad (\text{C5})$$

folgern. Auch wenn es sich mit (5.1) speziell um ein eindimensionales Modell aus Punktstreuern handelt, ist es an dieser Stelle möglich mit (C4) auf das erstmals durch CALLEN und WELTON formulierte Dissipations-Fluktuations-Theorem für allgemeine Systeme hinzuweisen [CW51]. Aufgrund der Aussage dieses Theorems sind die Korrelationsfunktionen mit den Responsfunktionen der entsprechend verwendeten Felder verknüpft. Diese Relation ist nur im Gleichgewicht des Systems gültig. Für das Nichtgleichgewichtssystem gibt es eine solche Relation nicht.

Die in den Feldkorrelationsfunktionen

$$\langle \hat{E}_i(\vec{r}, t) \hat{E}_j(\vec{r}, t + \tau) \rangle$$

eingehenden *Fluktuationen* der Felder müssen dann ebenfalls mit den aus der Responsfunktion hervorgehenden dissipativen Anteilen in Beziehung gesetzt werden können. Betrachtet man das System im Vakuumgrundzustand, so werden die Vakuumfluktuationen unendlich groß,

$$\langle 0 | \hat{\mathbf{E}}^2(x, t) | 0 \rangle \rightarrow \infty .$$

Diese Divergenz kann nicht so einfach eliminiert werden, da der Mittelwert des Feldes im Vakuumzustand verschwindet. Man kann daraus schließen, daß der Erwartungswert der berechneten Größe nicht an einem isolierten Raum-Zeit-Punkt messbar ist. Der Erwartungswert des Produktes von Mittelwerten der Feldoperatoren über endliche Raum-Zeit-Gebiete ist allerdings eine messbare Größe. In der gewöhnlichen Quantenmechanik werden daher nur Wellenpakete physikalisch sinnvoll, nicht jedoch die diesen konstituierenden ebenen Einzelwellen.

Man kann also festhalten, daß der Vakuumzustand nicht feldfrei ist. Die in ihm auftretenden Fluktuationen können indirekt gemessen werden. Sie führen z.B. zu Fluktuationen des Elektronenortes im Atom, die sich ähnlich wie eine Zitterbewegung auf das Elektron auswirken und zu einer schwachen Verschiebung der Energieniveaus führen, die als LAMB-Verschiebung bekannt ist.

Die Responsfunktion, die das *makroskopische* elektromagnetische Feld mit den durch das Rauschen hervorgerufenen Polarisationsfeldern verknüpft, ist nach (2.33)

durch die GREENS-Funktion gegeben. Betrachtet man speziell für das periodische Punktstreuermodell nur die frequenzabhängigen Observablen aus (6.16), so ergibt

$$\begin{aligned} \langle 0 | \hat{\mathcal{E}}(x, \omega) \hat{\mathcal{E}}^\dagger(x', \omega') | 0 \rangle &= \frac{\Im[\alpha(\omega)]}{\pi} \omega^2 (\omega')^2 \delta(\omega - \omega') \sum_m G_{\text{eff}}^*(x', ma, \omega') G_{\text{eff}}(x, ma, \omega) \\ &= \frac{\omega^2}{\pi} \Im[G(x', x, \omega)] \delta(\omega - \omega') , \end{aligned} \quad (\text{C6})$$

wobei zu beachten ist, daß es sich bei Polaritonen um Bosonen handelt,

$$\langle 0 | \hat{\mathbf{f}}_{m'}(\omega') \hat{\mathbf{f}}_m^\dagger(\omega) | 0 \rangle = \delta_{mm'} \delta(\omega - \omega')$$

und im Übergang von der ersten Zeile zur zweiten Zeile wieder von (C4) Gebrauch gemacht worden ist. Mit (C6) werden die Fluktuationen des elektrischen Feldes direkt durch den Imaginärteil der vollständigen GREENS-Funktion bestimmt bzw. sind proportional zum Imaginärteil der Polarisierbarkeit  $\alpha$  der hier verwendeten  $\delta$ -Streuer.

Die Vakuumfluktuationen haben extremen Einfluß auf die spontane Emission angeregter Zwei-Niveau-Systeme bzw. beschleunigen deren Zerfallsrate. Mit (C6) wird klar welche Bedeutung photonische Kristalle oder allgemein periodische Gitter in Bezug auf die sie durchdringenden Lichtfelder haben. Die Tatsache das die GREENS-Funktion alle Informationen über die Geometrie sowie dispersiven und absorptiven Eigenschaften des Hintergrundmediums enthält, kann dazu verwendet werden, um die Dynamik des spontanen Zerfalls zu beeinflussen, indem man die Vakuumfluktuationen durch die GREENS-Funktion in entsprechender Weise modifiziert. Für den Fall periodisch angeordneter Punktstreuer sind nach 5.1 die Parameter, mit denen man in der Weise am besten vorgeht, durch die Periode  $a$  und Polarisierbarkeit  $\alpha$  gegeben, da sie die Bandstruktur direkt beeinflussen können.

Befindet sich das System nicht im Grundzustand bei  $T = 0$ , so kommt es zu einer *inkohärenten* Überlagerung der reinen Zustände. Das *Quantengemisch* muß teilweise wieder klassisch gemittelt werden. CALLEN und WELTON haben für diesen Fall ein vereinfachtes, lineares Medium angenommen und können anstatt (C6) die Feldfluktuationen direkt in Verbindung zum Imaginärteil der Dielektrizitätsfunktion setzen [CW51].

Für (C6) kann entsprechend im kanonischen Ensemble auf die BOSE-EINSTEIN-Statistik zurückgegriffen werden,

$$\langle \hat{\mathbf{f}}_{m'}^\dagger(\omega') \hat{\mathbf{f}}_m(\omega) \rangle = \delta_{mm'} \delta(\omega - \omega') \frac{1}{\exp\left[\frac{\omega}{k_B T}\right] - 1}$$

sich mit (6.14) und (6.15) für die in die Korrelationsfunktion eingehenden Feldfluktuationen:

und man bringt zusätzlich die Temperatur sowie die mittlere Besetzungszahl ins Spiel,

$$\begin{aligned} \langle \hat{\mathcal{E}}(x, \omega) \hat{\mathcal{E}}^\dagger(x', \omega') \rangle &= \frac{1}{\pi} \frac{\omega^2}{1 - \exp\left[-\frac{\omega}{k_B T}\right]} \\ &\times \Im[G(x', x, \omega)] \delta(\omega - \omega') . \end{aligned}$$

Da es sich um ein antinormalgeordnetes Produkt handelt, werden damit die negativen Frequenzanteile beschrieben.

Weil das Dissipations-Fluktuations-Theorem immer die klassischen Größen mit den quantenmechanischen und thermischen Feldfluktuationen verbindet, muß letztendlich jedes Quantisierungsschema wieder in irgendeiner Form auf das Dissipations-Fluktuations-Theorem führen. Wie in [Hen04] gezeigt, wird dieses auch für den Fall der Modenzerlegung erfüllt.

### Normierung der Modenfunktionen

An dieser Stelle sollen die Modenfunktionen (6.42) und (6.43) normiert werden, die sich für die Modenzerlegung in 6.4 aus den Eigenvektoren der Transfermatrizen konstruieren lassen. Damit man mit dem Spektrum der Besetzungszahloperatoren  $\hat{\mathbf{n}}_{km} = \hat{\mathbf{a}}_{km}^\dagger \hat{\mathbf{a}}_{km}$  auch die Anzahl der Anregungen des elektromagnetischen Feldes bzw. die Photonen erfassen kann, müssen die Felder bzw. die Modenfunktionen mit (6.7) auf die richtige Energie bzw. Energiedichte des Strahlungsfeldes normiert werden. Wenn man für die Modenzerlegung die Form (6.8) wählt, dann wird dieses nach 6.1 erreicht, indem man die Modenfunktionen mit (6.9) auf das jeweilige Quantisierungsvolumen normiert. In einer unendlich ausgedehnten, periodischen Struktur macht es ohnehin nur Sinn sich auf die Energie oder Zustandsdichte in einer Einheitszelle zu konzentrieren. Das Quantisierungsvolumen  $L$  wird daher auf eine Periode  $a$  reduziert und die Modenfunktionen entsprechend normiert:

$$\begin{aligned} \int_{\text{WS}} dx \epsilon(x) |A_0^+(x, \omega)|^2 &= \int_0^a dx [1 + \alpha \delta(x) \\ &\quad + \alpha \delta(x - a)] |A_0^+(x, \omega)|^2 \\ &= a . \end{aligned}$$

Dabei ist die Einheitszelle so gestaltet, daß sich an den beiden Enden jeweils ein Punktstreuer befindet. Integriert man über das Gebiet einer Einheitszelle, liefern die Punktstreuer daher jeweils nur den halben Beitrag zur Integration. Weiterhin sind alle Größen, die sich im weiteren Verlauf aus den so normierten Eigenfunktionen ergeben, immer auf die Einheitszelle zu beziehen bzw. pro Einheitszelle zu bewerten.

Die Modenzerlegung bleibt nur im Rahmen schwacher Absorption gültig, wobei mit

$$\Re(\alpha) \gg \Im(\alpha)$$

im Folgenden immer  $\alpha \in \{\mathbb{R}^+ + i0\}$  gelten soll und damit der Eigenwert  $\lambda_+$  immer auf dem Einheitskreis liegen wird. Welche Einheitszelle man wählt, spielt aufgrund der Periodizität keine Rolle, vorzugsweise wähle man daher  $\nu=0$ . Mit demselben Argument hat auch die Richtung der propagierenden Moden keine Bedeutung, so daß  $A_0^-(x, \omega)$  mit  $A_0^+(x, \omega)$  automatisch normiert wer-

den kann. Die Modenfunktion (6.42) läßt sich mit  $\nu=0$  vereinfachen zu:

$$A_0^+(x, \omega) = \frac{1}{N(\omega)} \{2i\lambda_+ \sin[\omega x] + 2i \sin[\omega(a-x)]\} . \quad (\text{C7})$$

Aus [BS87] entnehme man:

$$\int dx \sin^2[\omega x] = \frac{x}{2} - \frac{\sin[2\omega x]}{4\omega} , \quad (\text{C8})$$

$$\int dx \sin[\omega x] \sin[\omega(a-x)] = -\frac{\cos[\omega a]}{2} x - \frac{\sin[\omega(a-2x)]}{4\omega} , \quad (\text{C9})$$

$$\sin[2\omega a] = 2 \sin[\omega a] \cos[\omega a] . \quad (\text{C10})$$

Mit (C7) ergibt sich zunächst:

$$\begin{aligned} |A_0^+(x, \omega)|^2 &= \frac{1}{|N(\omega)|^2} \{4 |\lambda_+|^2 \sin^2[\omega x] + 4 \sin^2[\omega(a-x)] + 8\Re(\lambda_+) \sin[\omega x] \sin[\omega(a-x)]\} \\ &\stackrel{\Im(\alpha) \rightarrow 0}{=} \frac{1}{|N(\omega)|^2} \{4 \sin^2[\omega x] + 4 \sin^2[\omega(a-x)] + 4\{2 \cos[\omega a] - \omega\alpha \sin[\omega a]\} \sin[\omega x] \sin[\omega(a-x)]\} \end{aligned}$$

und weiterhin mit (C8), (C9) und (C10) für die Normierungskonstante:

$$\begin{aligned} \int_{\text{WS}} dx \epsilon(x) |N(\omega) A_0^+|^2 &= 4\alpha \sin^2[\omega a] + 8 \left\{ \frac{a}{2} - \frac{\sin[2\omega a]}{4\omega} \right\} + 4 \{2 \cos[\omega a] - \omega\alpha \sin[\omega a]\} \left\{ \frac{\sin[\omega a]}{2\omega} - \frac{\cos[\omega a]}{2} a \right\} \\ &= 2\alpha \sin^2[\omega a] + 4a \sin^2[\omega a] + 2\omega a \alpha \sin[\omega a] \cos[\omega a] \\ &= a |N(\omega)|^2 . \end{aligned}$$

Mit der so ermittelten Normierungskonstante,

$$N(\omega) = \sqrt{2} \sin(\omega a) \sqrt{\frac{\alpha}{a} + 2 + \omega\alpha \cot(\omega a)} ,$$

ergibt sich daher für die in die unterschiedlichen Richtungen propagierenden Moden:

$$A_0^+(x, \omega) = \frac{\{2i\lambda_+ \sin[\omega x] + 2i \sin[\omega(a-x)]\}}{\sqrt{2} \sin(\omega a) \sqrt{\frac{\alpha}{a} + 2 + \omega\alpha \cot(\omega a)}} , \quad (\text{C11})$$

$$A_0^-(x, \omega) = \frac{\{2i \sin[\omega x] + 2i\lambda_+ \sin[\omega(a-x)]\}}{\sqrt{2} \sin(\omega a) \sqrt{\frac{\alpha}{a} + 2 + \omega\alpha \cot(\omega a)}} . \quad (\text{C12})$$



## Anhang D: ANHANG ZU 8

## Berechnung der Zerfallsrate einer Dipolkette

Die Information über die zusätzliche Veränderung der Bandstruktur durch eine absorbierende Eigenschaft der Punktstreuer kann mit Hilfe einer Kette aus punktförmigen Dipolen gewonnen werden, indem man nach FERMI'S

$$\gamma_{e \rightarrow g} = 2 |d|^2 \frac{\omega^4 \Im[\alpha(\omega)]}{2N+1} \sum_{\mu, \nu=-N}^N \sum_m e^{ika(\nu-\mu)} G_{\text{eff}}^*(\nu a + \delta x, ma, \omega) G_{\text{eff}}(\mu a + \delta x, ma, \omega) . \quad (\text{D1})$$

Die Schwierigkeit bei der Bestimmung der Zerfallsrate liegt in der Summation über das Produkt der beiden effektiven GREENS-Funktionen an den unterschiedlichen Orten  $\nu a + \delta x$ ,  $\mu a + \delta x$  der einzelnen Dipole in den Einheitszellen und der damit einhergehenden Fallunterscheidung, wo sich der jeweilige Dipol relativ zum anderen in

Goldener Regel die Zerfallsrate eben dieser Kette zu bestimmen versucht. Zunächst soll eine begrenzte Anzahl von  $2N + 1$  Dipolen in der  $\infty$ -periodischen Struktur der Punktstreuer betrachtet werden. Mit  $N \rightarrow \infty$  soll das Verhalten der gesamten Struktur bei vorhandener Absorption untersucht werden.

Nach 8.2 ist die Zerfallsrate des kollektiven Dipols gegeben durch:

der periodischen Struktur zu befinden hat. Alle Dipole besitzen mit  $\delta x \in [0, a]$  den gleichen Abstand zum Streuer in der linken Ecke der Einheitszelle, so daß man die effektive GREENS-Funktion in Anlehnung an die bereits schon mehrmals verwendete Form (6.36) wie folgt angeben kann:

$$G_{\text{eff}}(\nu a + \delta x, ma, \omega) = \begin{cases} e^{iq(\omega)a(\nu-m)} A_0(\delta x, \omega) & : m \leq \nu \\ e^{iq(\omega)a(m-\nu-1)} A_0(a - \delta x, \omega) & : m > \nu . \end{cases}$$

Der Eigenwert  $\lambda_+$  ist dabei nach 3.1 auf die Form  $\lambda_+ = e^{iq(\omega)a}$  gebracht worden, wobei  $q(\omega)$  eine komplexe Funktion ist, mit der der Eigenwert  $\lambda_+$  mindestens auf oder im Einheitskreis existiert.

Das Problem vereinfacht sich, wenn man zuerst die

Summation über die einzelnen Streuer an den Stellen  $ma$  vollzieht und dabei die Fallunterscheidung bezüglich der Dipolpositionen beachtet. Mit Hilfe der Summe der geometrischen Reihe ergibt sich für den Fall  $\mu > \nu$ :

$$\begin{aligned} \sum_m G_{\text{eff}}^*(\nu a + \delta x, ma, \omega) G_{\text{eff}}(\mu a + \delta x, ma, \omega) &\stackrel{\mu \geq \nu}{=} \sum_{-\infty}^{\nu} \exp[iq(\omega)a(\mu - m) - iq^*(\omega)a(\nu - m)] |A_0(\delta x, \omega)|^2 \\ &+ \sum_{\nu+1}^{\mu} \exp[-iq^*(\omega)a(m - \nu - 1) + iq(\omega)(\mu - m)] |A_0(a - \delta x, \omega)|^2 \\ &+ \sum_{\mu+1}^{\infty} \exp[-iq^*(\omega)a(m - \nu - 1) + iq(\omega)a(m - \mu - 1)] \\ &\quad \times A_0^*(a - \delta x, \omega) A_0(\delta x, \omega) \\ &\stackrel{\mu \geq \nu}{=} \frac{e^{-iq(\omega)a(\nu-\mu)}}{1 - |\lambda_+|^2} |A_0(\delta x, \omega)|^2 + \frac{e^{iq^*(\omega)a(\nu-\mu)}}{1 - |\lambda_+|^2} |A_0(a - \delta x, \omega)|^2 \\ &+ \frac{e^{iq^*(\omega)a(\nu-\mu)} - e^{-iq(\omega)a(\nu-\mu)}}{e^{-iq^*(\omega)a} - e^{iq(\omega)a}} A_0^*(a - \delta x, \omega) A_0(\delta x, \omega) . \quad (\text{D2}) \end{aligned}$$

Neben der Summe der geometrischen Reihe ist dabei auch von den Partialsummen,

$$\sum_{k=0}^{N-1} z^k = \frac{z^N - 1}{z - 1}, \quad z \in \mathbb{C}, \quad |z| \neq 1, \quad (\text{D3})$$

der geometrischen Reihe Gebrauch gemacht worden. Für den Fall  $\mu = \nu$  bzw.  $\mu < \nu$  ergibt sich nach einfacher bzw. ähnlicher Rechnung:

$$\sum_m G_{\text{eff}}^*(\nu a + \delta x, ma, \omega) G_{\text{eff}}(\mu a + \delta x, ma, \omega) \stackrel{\mu \equiv \nu}{=} \left( \frac{1}{1 - |\lambda_+|^2} \right) \left( |A_0(\delta x, \omega)|^2 + |A_0(a - \delta x, \omega)|^2 \right), \quad (\text{D4})$$

$$\begin{aligned} \sum_m G_{\text{eff}}^*(\nu a + \delta x, ma, \omega) G_{\text{eff}}(\mu a + \delta x, ma, \omega) \stackrel{\mu \leq \nu}{=} & \frac{e^{-iq^*(\omega)a(\nu-\mu)}}{1 - |\lambda_+|^2} |A_0(\delta x, \omega)|^2 + \frac{e^{iq(\omega)a(\nu-\mu)}}{1 - |\lambda_+|^2} |A_0(a - \delta x, \omega)|^2 \\ & + \frac{e^{iq(\omega)a(\nu-\mu)} - e^{-iq^*(\omega)a(\nu-\mu)}}{e^{iq(\omega)a} - e^{-iq^*(\omega)a}} A_0(a - \delta x, \omega) A_0^*(\delta x, \omega). \end{aligned} \quad (\text{D5})$$

Nachdem man nun erfolgreich über alle Streuer in der  $\infty$ -periodischen Struktur summiert hat, muß man (D2), (D4) und (D5) zusammen mit der in (D1) eingehenden Phase über die einzelnen, zunächst endlich vorhandenen Dipole summieren.

Die Funktion  $A_0(\delta x, \omega)$  aus der effektiven GREENS-Funktion ist unabhängig von der Einheitszelle, in der sich der Dipol befindet, so daß man zur weiteren Auswertung

wieder nur die Partialsummen der geometrischen Reihe (D3) auszuwerten braucht. Bei der Auswertung der Doppelsumme aus (D1) ist wieder die in (D2), (D4) und (D5) getroffene Fallunterscheidung zu beachten. Ist die Summation erfolgt, kann der Grenzübergang  $N \rightarrow \infty$  vollzogen werden. Für die bei der Summation über die einzelnen Dipole in der Doppelsumme aus (D2), (D4) und (D5) eingehenden Terme ergibt sich mit  $f(\omega) \in \{q(\omega), q^*(\omega)\}$ :

$$\begin{aligned} \frac{1}{2N+1} \sum_{\nu=-N}^{N-1} \sum_{\mu=\nu+1}^N e^{i[ka \pm f(\omega)a](\nu-\mu)} \stackrel{\mu \geq \nu}{=} & \frac{e^{i[ka \pm f(\omega)a]}}{2N+1} \sum_{\nu=-N}^{N-1} \frac{e^{-i[ka \pm f(\omega)a](N-\nu)} - 1}{e^{-i[ka \pm f(\omega)a]} - 1} \\ \stackrel{\mu \geq \nu}{=} & \frac{e^{i[ka \pm f(\omega)a]}}{2N+1} \left\{ \frac{1}{e^{-i[ka \pm f(\omega)a]} - 1} \frac{e^{i2N[ka \pm f(\omega)a]} - 1}{e^{i(2N+1)[ka \pm f(\omega)a]} - e^{i2N[ka \pm f(\omega)a]}} \right. \\ & \left. + \frac{2N-1}{1 - e^{-i[ka \pm f(\omega)a]}} \right\} \\ \stackrel{N \rightarrow \infty}{=} & \frac{1}{e^{i[ka \pm f(\omega)a]} - 1}, \end{aligned}$$

$$\frac{1}{2N+1} \sum_{\nu=-N}^N \sum_{\mu=-N}^N \delta_{\mu\nu} \stackrel{\mu \equiv \nu}{=} 1,$$

$$\begin{aligned} \frac{1}{2N+1} \sum_{\nu=1-N}^N \sum_{\mu=-N}^{\nu-1} e^{i[ka \pm f(\omega)a](\nu-\mu)} \stackrel{\mu \leq \nu}{=} & \frac{1}{2N+1} \sum_{\nu=1-N}^N \frac{1 - e^{i[ka - f(\omega)a](N-\nu)}}{e^{-i[ka - f(\omega)a]} - 1} \\ \stackrel{N \rightarrow \infty}{=} & \frac{1}{e^{-i[ka \pm f(\omega)a]} - 1}, \end{aligned}$$

so daß man letztendlich aus (D1) für die Zerfallsrate eines kollektiven Dipols in der  $\infty$ -periodischen Struktur aus

Punktstreuern findet:

$$\gamma_{e \rightarrow g} = 2|d|^2 \omega^4 \Im(\alpha) \left\{ \frac{|A_0(\delta x, \omega)|^2 + |A_0(a - \delta x, \omega)|^2}{1 - |\lambda_+|^2} + 2\Re \left\{ \left( \frac{1}{1 - |\lambda_+|^2} \right) \left( \frac{|A_0(\delta x, \omega)|^2}{e^{ika}/\lambda_+ - 1} + \frac{|A_0(a - \delta x, \omega)|^2}{e^{ika}/(\lambda_+)^* - 1} \right) + \left( \frac{1}{(\lambda_+)^* - \lambda_+} \right) \underbrace{\left( \frac{A_0^*(a - \delta x, \omega)A_0(\delta x, \omega)}{e^{ika}/(\lambda_+)^* - 1} - \frac{A_0^*(a - \delta x, \omega)A_0(\delta x, \omega)}{e^{ika}/\lambda_+ - 1} \right)}_{\gamma^+} \right\} \right\}. \quad (D6)$$

Man kann an dieser Stelle einen Schritt weiter gehen und sich der Frage zuwenden, was mit der Zerfallsrate der Dipolkette geschieht, wenn die Absorption im Gitter verschwindet. Erwartungsgemäß darf man auch nur für die im absorptionsfreien Fall entstehenden Feldmoden eine Zerfallsrate wiederfinden, welche für eine entsprechende Anregung nach  $k_0(\omega_0)$  erlaubt sind.

Bevor aber der Grenzübergang  $\Im(\alpha) \rightarrow 0$  vollzogen wird, sollen zunächst einige grundsätzliche Dinge hervorgehoben werden. Auf die Magie der Distributionen ist teilweise in den Abschnitten zuvor schon hingewiesen worden. Eine besondere Form bilden die periodischen Distributionen, die direkt aus FOURIER-Reihen hervorgehen können. Jede trigonometrische Reihe,

$$\sum_{m=-\infty}^{+\infty} c_m e^{imt},$$

deren Koeffizienten mit

$$|m|^n c_m \stackrel{|m| \rightarrow \infty}{\rightarrow} 0$$

nicht allzu schnell wachsen, konvergieren distributionell gegen eine  $2\pi$ -periodische Distribution, denn dann konvergiert mit einem geeigneten  $n \in \mathbb{N}$  die Reihe

$$f(t) = \sum_{m=-\infty}^{+\infty} \frac{c_m}{(im)^n} e^{imt}, \quad m \neq 0$$

gleichmäßig gegen eine Funktion  $f$ , stellt also eine  $2\pi$ -periodische Funktion dar. Mit der *verallgemeinerten*  $n$ -ten Ableitung  $\partial^n f$  von  $f$  folgt:

$$T_f = \sum_{m=-\infty}^{+\infty} c_m e^{imt} = c_0 + \partial^n f.$$

Da für ein  $\phi \in \mathcal{D}^{18}$  und  $m \in \mathbb{Z}$  stets

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dt e^{imt} \phi(t) = \int_{-\infty}^{+\infty} dt e^{imt} \phi(t + 2m\pi)$$

gilt, ist  $T_f$  mit

$$\langle T_f(t + 2\pi m), \phi(t) \rangle = \langle T_f(t), \phi(t - 2\pi m) \rangle = \langle T_f, \phi \rangle$$

eine  $2\pi$ -periodische Distribution. Diese Aussage ist wirklich erstaunlich. Denn während die klassischen FOURIER-Reihen nur dann überall punktweise konvergieren können, wenn dabei die  $c_m$  notwendigerweise eine Nullfolge bilden, wird im distributionellen Sinn immer noch Konvergenz erreicht, wenn die Koeffizienten  $c_m$  hinreichend langsam anwachsen. Diese aus den FOURIER-Reihen hervorgehenden Distributionen dürfen sogar noch gliedweise differenziert werden, was im Sinne der klassischen Analysis undenkbar wäre.

Das erwähnen dieser Tatsache ist insofern sinnvoll, da bei der Auswertung von (D6) im Limes  $\Im(\alpha) \rightarrow 0$  davon Gebrauch gemacht werden soll. Dazu betrachte man die endliche,  $2\pi$ -periodische Folge

$$T_N = \sum_{m=-N}^N e^{imt},$$

die für kein  $t \in \mathbb{R}$  konvergiert und mit wachsendem  $N$  immer stärker oszilliert. Im Limes  $N \rightarrow \infty$  muß diese Folge wieder gegen eine  $2\pi$ -periodische Distribution distributionell konvergieren. Es gilt:

$$\sum_{m=-\infty}^{+\infty} e^{imt} = 1 + 2 \sum_{m=1}^{+\infty} \cos[mt] = 1 + 2 \frac{\partial}{\partial t} \sum_{m=1}^{+\infty} \frac{\sin[mt]}{m}.$$

Dabei ist mit

$$S(t) = \sum_{m=1}^{+\infty} \frac{\sin[mt]}{m} = \begin{cases} \frac{\pi - t}{2} & : 0 < t < 2\pi \\ 0 & : t = 0 \end{cases} \quad (D7)$$

eine Form der bekannten Sägezahnfunktion gegeben [Wal99], [Str94], die mit (D7) bereits eine  $2\pi$ -periodische, verallgemeinerte Funktion darstellt,

$$S(t) = S(t + 2\pi m).$$

Um  $T_\infty$  als ein Funktional auf  $\mathcal{D}$  oder einer höheren Klasse von Funktionen auffassen zu können, muß  $S(t)$  einer verallgemeinerten Ableitung unterzogen werden. Dazu erinnere man sich an die Merkregel für eben solche Ableitungen [Str94]: Hat die Funktion  $S(t)$  bei  $t_0$  einen Knick, bei  $t_1$  einen Sprung und ist ansonsten differenzierbar, so entsteht bei der verallgemeinerten Ableitung von  $S(t)$  bei  $t_0$  ein Sprung von  $S'(t_0^-)$  auf  $S'(t_0^+)$  und bei  $t_1$  ein  $\delta$ -Impuls der Stärke  $S(t_1^+) - S(t_1^-)$ . Die distributionelle oder verallgemeinerte Ableitung von (D7) liefert daher:

$$\sum_{m=1}^{\infty} \cos[mt] = -\frac{1}{2} + \pi \sum_{m=-\infty}^{\infty} \delta(t - 2\pi m). \quad (\text{D8})$$

Damit konvergiert  $T_\infty$  gegen eine  $2\pi$ -periodische Distribution, im speziellen einem DIRAC-Kamm,

$$T_\infty = \sum_{m=-\infty}^{+\infty} e^{imt} = 2\pi \sum_{m=-\infty}^{+\infty} \delta(t - 2\pi m)$$

und ist damit ausnahmslos eine singuläre Distribution.

Mit diesem Werkzeug ausgestattet kann man nun problemlos den Grenzübergang  $\Im(\alpha) \rightarrow 0$  in (D1) vollziehen. Beim Grenzübergang spielt immer nur der Nenner der in (D1) auftretenden Terme eine entscheidende Rolle. Existiert bei der Entwicklung in  $\Im(\alpha)$  ein Term nullter Ordnung im Nenner, spielen die betreffenden Ausdrücke nur eine untergeordnete Rolle und können im Limes als nullte Ordnung vernachlässigt werden. Man kann sich leicht davon überzeugen, daß dies für die in die Funktion  $A_0(\delta x, \omega)$  eingehenden Amplituden  $\xi_1, \zeta_1$  mit (6.31) und (6.32), sowie für den Term  $\gamma^+$  in (D1) mit dem entsprechenden Vorfaktor der Fall ist. Am Ende ist es wieder ausreichend das Betragsquadrat des Eigenwertes  $\lambda_+$  zu entwickeln,

$$|\lambda_+|^2 = 1 - \frac{2\omega}{\sqrt{4 + 4\omega\alpha \cot[\omega\alpha] - \omega^2\alpha^2}} \Im(\alpha) + \mathcal{O}\left\{[\Im(\alpha)]^2\right\}$$

und mit  $\alpha \in \{\mathbb{R}^+ + i0\}$  und  $q(\omega) = q^*(\omega)$  die verbleibenden Terme mit Hilfe von (D8) auszuwerten:

$$\begin{aligned} \gamma_{e \rightarrow g} \stackrel{\Im(\alpha) \rightarrow 0}{=} & |d|^2 \omega^3 \sqrt{4 + 4\omega\alpha \cot[\omega\alpha] - \omega^2\alpha^2} \left\{ |A_0(\delta x, \omega)|^2 + |A_0(a - \delta x, \omega)|^2 \right. \\ & \left. + 2\Re \left\{ |A_0(\delta x, \omega)|^2 \sum_{m=1}^{+\infty} e^{i[q(\omega)a - ka]m} + |A_0(a - \delta x, \omega)|^2 \sum_{m=1}^{+\infty} e^{-i[q(\omega)a + ka]m} \right\} \right\} \\ \stackrel{\Im(\alpha) \rightarrow 0}{=} & 2\pi |d|^2 \omega^3 \sqrt{4 + 4\omega\alpha \cot[\omega\alpha] - \omega^2\alpha^2} \left\{ |A_0(\delta x, \omega)|^2 \sum_{-\infty}^{+\infty} \delta[q(\omega)a - ka - 2\pi m] \right. \\ & \left. + |A_0(a - \delta x, \omega)|^2 \sum_{-\infty}^{+\infty} \delta[q(\omega)a + ka - 2\pi m] \right\} \\ \stackrel{\Im(\alpha) \rightarrow 0}{=} & \pi |d|^2 \omega \frac{\partial k(\omega)}{\partial \omega} \left\{ |A_0^+(\delta x, \omega)|^2 \sum_{-\infty}^{+\infty} \delta[q(\omega)a - ka - 2\pi m] + |A_0^-(\delta x, \omega)|^2 \sum_{-\infty}^{+\infty} \delta[q(\omega)a + ka - 2\pi m] \right\}. \end{aligned}$$

Dabei sind in der letzten Zeile die Funktionen  $A_0(\delta x, \omega)$  und  $A_0(a - \delta x, \omega)$  mit Hilfe des Koeffizienten  $c_1$  aus (6.44) durch die Modenfunktionen (C11) und (C12) ersetzt worden und ist von der inversen Darstellung der Gruppengeschwindigkeit (6.48) Gebrauch gemacht worden. Die Zerfallsrate wird damit im Fall verschwindender Absorption zu einem verallgemeinerten Objekt und liegt erwartungsgemäß genau auf der durch  $k_0(\omega_0)$  vorgegebenen Bandstruktur. Läßt man mit  $\Re(\alpha) \rightarrow 0$  auch noch die Dispersion des Gitters verschwinden, so erhält man wieder die üblichen Modenfunktionen des freien Strahlungsfeldes

und die Vakuumlichtgeschwindigkeit, so daß die Stärke der in den DIRAC-Kämmen eingehenden  $\delta$ -Impulse direkt durch die in 7 bereits erwähnte Zerfallsrate eines freien Zwei-Niveau-Atoms gegeben wird.

- [BH03] Geesche Boedecker and Carsten Henkel. All-frequency effective medium theory of a photonic crystal. *OPTICS EXPRESS*, 11(13):1590, 2003.
- [BS87] I.N. Bronstein and K.A. Semendjajew. *Taschenbuch der Mathematik*. BSB B.G Teubner Verlagsgesellschaft, Leipzig, 1987.
- [Bus00] Rolf Busam. *Funktionentheorie 1*. Springer Verlag, Berlin, 3 edition, 2000.
- [BW80] Max Born and Emil Wolf. *Principles of Optics*. Pergamon Press, Oxford, 6 edition, 1980.
- [CH98] M. Chaichian and R. Hagedorn. *Symmetries in Quantum Mechanics, Graduate Student Series in Physics*. Institute of Physics Publishing, Bristol and Philadelphia, 1998.
- [CTDRG89] Claude Cohen-Tannoudji, Jacques Dupont-Roc, and G. Grynberg. *Photons and Atoms - Introduction to Quantum Electrodynamics*. John Wiley & Sons, Inc., New York, 1989.
- [CTDRG92] Claude Cohen-Tannoudji, Jacques Dupont-Roc, and G. Grynberg. *Atom-Photon Interactions*. John Wiley & Sons, Inc., New York, 1992.
- [CW51] Herbert B. Callen and Theodore A. Welton. Irreversibility and generalized noise. *Phys. Rev.*, 83:34–40, 1951.
- [GW96a] T. Gruner and D.-G. Welsch. Green-function approach to the radiation-field quantization for homogeneous and inhomogeneous kramers-kronig dielectrics. *Phys. Rev. A*, 53(3):1818, 1996.
- [GW96b] T. Gruner and D.-G. Welsch. Quantum-optical input-output relations for dispersive and lossy multilayer dielectric plates. *Phys. Rev. A*, 54(2):1661, 1996.
- [HB92] Bruno Huttner and Stephen M. Barnett. Quantization of the electromagnetic field in dielectrics. *Phys. Rev. A*, 46(7):4306, 1992.
- [Hen04] Carsten Henkel. *Coherence theory of atomic de Broglie waves and electromagnetic near fields*. Habilitationsschrift, Universität Potsdam, 2004.
- [HLJ<sup>+</sup>04] Kerwyn Casey Huang, Eleftherios Lidorikis, Xun-ya Jiang, John D. Johannopoulos, Keith A. Nelson, Peter Bienstman, and Shanhui Fan. Nature of lossy bloch states in polaritonic photonic crystals. *Phys. Rev. B*, 69:195111–195121, 2004.
- [Jac02] John David Jackson. *Klassische Elektrodynamik*. Verlag Walter de Gruyter, Berlin, New York, 3 edition, 2002.
- [KW98] Ludwig Knöll and Dirk-Gunnar Welsch. Qed in dispersing and absorbing media. *Phys. Rev. A*, 58:700, 1998.
- [MBM<sup>+</sup>04] R.C. McPhedran, L.C. Botton, J. McOrist, A.A. Asatryan, C.M. Sterke, and N.A. Nicorovici. Density of states functions for photonic crystals. *Phys. Rev. E*, 69:016609–016622, 2004.
- [Mer98] Eugen Merzbacher. *Quantum Mechanics*. Wiley, Hoboken, 3 edition, 1998.
- [Mor99] A. Moroz. Minima and maxima of the local density of states for one-dimensional periodic systems. *Europhys. Lett.*, 46(4):419–424, 1999.
- [Pen94] J. B. Pendry. Symmetry and transport of waves in one-dimensional disordered systems. *ADVANCES IN PHYSICS*, 43(4):461–542, 1994.
- [Sak02] Kazuaki Sakoda. *Optical Properties of Photonic Crystals*. Springer Verlag, Berlin, Heidelberg, New York, 2002.
- [Sch01] Wolfgang P. Schleich. *Quantum Optics in Phase Space*. WILEY-VCH Verlag, Berlin, 1 edition, 2001.
- [Som78] A. Sommerfeld. *Partielle Differentialgleichungen der Physik, Vorlesungen über theoretische Physik, Band 6*. Verlag Harry Deutsch, Thun, 1978.
- [Str94] R. Strichartz. *A Guide to Distribution Theory and Fourier Transforms*. CRC Press, Boca Raton, 1994.
- [Wal99] Wolfgang Walter. *Analysis 1*. Springer Verlag, Berlin, Heidelberg, New York, 5 edition, 1999.
- [Wie99] Hartmut Wiebe. *Lehrbuch der Mathematik, Band 2, Lineare Algebra*. Spektrum Akademischer Verlag, Berlin, 2 edition, 1999.
- [WM94] D.F. Walls and G.J. Milburn. *Quantum Optics*. Springer Verlag, Berlin, Heidelberg, New York, 1 edition, 1994.
- [WW30] V. Weisskopf and E. Wigner. Berechnung der natürlichen linienbreite auf grund der diracschen lichttheorie. *ZS. f. Phys.*, 63, 1930.
- [YMSS01] T. Yonte, J.J. Monzon, and L.L. Sanchez-Soto. Basic factorization for multilayers. *Opt. Lett.*, 26:370–372, 2001.
- [YMSS<sup>+</sup>02] T. Yonte, J.J. Monzon, L.L. Sanchez-Soto, J.F. Carinena, and C. Lopez-Lacasta. Understanding multilayers from a geometrical viewpoint. *L. Opt. Soc. Am. A*, 19:603–609, 2002.
- [YMSSC01] T. Yonte, J.J. Monzon, L.L. Sanchez-Soto, and J.F. Carinena. Simple trace criterion for classification of multilayers. *Opt. Lett.*, 26:1400–1402, 2001.



## **Erklärung gemäß Prüfungsordnung**

Hiermit versichere ich, daß ich diese Arbeit selbstständig verfaßt und keine anderen als die angegebenen Hilfsmittel und Quellen benutzt habe.

Potsdam, den 7.November 2005