

Wie Dipolnäherung:

$$\underline{A}(\underline{r}, t) \approx \underline{A}(\underline{r}=0, t)$$

Kein nulltes Ordnung in der Taylorentwicklung!

System gekoppelter Ladung ist lokalisiert um $\underline{r}=0$
Annahme: In diesem Bereich ist die räuml. Variation von \underline{A} ~~mit~~ sehr schwach

$$\Rightarrow \hat{H}_{PA} = \sum_{i=1}^N \frac{(p_i - q_i \underline{A}(0, t))^2}{2m} + \hat{H}_{\text{feld}} + W_{\text{Coulomb}}$$

dann: unitäre Transformations

$$\hat{T} = e^{-i\hbar^{-1} \int d\vec{r} \hat{A}}$$

mit $\hat{d} = \sum_{i=1}^N q_i \underline{r}_i$, \hat{A} in Moden entwickelt

quantisiert $\sum_{\underline{k}} \hbar \omega_{\underline{k}} (\hat{a}_{\underline{k}} \hat{a}_{\underline{k}}^\dagger + \frac{1}{2})$

$$\Rightarrow \hat{H}_{dE} = \hat{T} \hat{H}_{PA} \hat{T}^\dagger = \underbrace{\sum_{i=1}^N \frac{p_i^2}{2m}}_{\hat{H}_{\text{Teilchen}}} + W_{\text{Coulomb}} + \hat{H}_{\text{feld}} + \hat{H}_{\text{Dipol}} + \sum_{\underline{k}} \frac{(d \cdot \underline{u}_{\underline{k}}(0))^2}{\epsilon_0}$$

mit $\hat{H}_{\text{Dipol}} = -\hat{d} \cdot \hat{\underline{E}}$

mit $\hat{\underline{E}} = i \sum_{\underline{k}} \frac{\hbar \omega_{\underline{k}}}{\epsilon_0} \left(\underline{u}_{\underline{k}}(0) \hat{a}_{\underline{k}} - \underline{u}_{\underline{k}}^*(0) \hat{a}_{\underline{k}}^\dagger \right)$

Wie ~~bei~~ in der klass. Elektrodynamik!

$\underline{E}(\underline{r}=0, t=0)$

Strategie jetzt: Behandle Einfluss der Strahlung störungstheoretisch, mit

Störoperatoren $\hat{V} = \hat{H}_{\text{Dipol}}$, vernachlässige Korrekturen $\sim (d \cdot \underline{u}_{\underline{k}}(0))^2$

IV.4.2. Matrixelemente in Dipolnäherung

betrachte $\langle m | \hat{H}_{\text{Dipol}} | n \rangle$

mit $|m\rangle, |n\rangle$ Eigenzustände von $\hat{H}_{\text{Teilchen}}$ ("ungestörte Anteile")

Zunächst semi-klassisch:

betrachte das Feld \in klassisch

$$\Rightarrow \hat{a}_{\underline{k}} \rightarrow a_{\underline{k}} \quad \hat{a}_{\underline{k}}^\dagger \rightarrow a_{\underline{k}}^*$$

Zähler!

\Rightarrow Die interessierende Matrixelemente habe die Form

$$\langle m | \hat{d} \cdot \underline{u}_{\underline{k}}(0) | n \rangle \quad \text{mit} \quad \hat{d} = \sum_i q_i \hat{r}_i$$

Betrachte z.B. Wasserstoffatom (eracht lösbar!), $\hat{d} = q \hat{r}$

$|m\rangle, |n\rangle$ parametrisiert durch $|l, m, n\rangle$

Es gilt (hier ohne Beweis)

Orthogonalität $R_{lm}(r) Y_{lm}(\vartheta, \varphi)$
 Radial- \times Y_{lm}
 central \times Kugelkoordinaten

$$\langle n_1, l_1, m_1 | \hat{r} | n_2, l_2, m_2 \rangle = -(-1)^{l_1 + l_2} \langle n_1, l_1, m_1 | \hat{r} | n_2, l_2, m_2 \rangle$$

Das ist Folge der Tatsache, dass \hat{r} unter Parity ungerade ist (ungerade Parität)

Konsequenz: Matrixelemente $\langle m | \hat{d} \cdot \underline{u}_{\underline{k}}(0) | n \rangle$ sind nur dann von Null verschieden, wenn $l_2 = l_1 \pm 1$

"Dipol-Auswahlregeln" Teil I

Je nach Richtung der Mode $\underline{u}_{\underline{k}}(0)$ kommt es zu weiteren Einschränkungen, die bestimmen, welche Übergänge stattdessen

z.B. $\langle n_1, l_1, m_1 | \hat{z} | n_2, l_2, m_2 \rangle \neq 0$ falls $m_1 = m_2$
 (und $l_2 = l_1 \pm 1$)

Dipol-
Auswahl-
regeln
Teil II

$\langle n_1, l_1, m_1 | \hat{x} + i\hat{y} | n_2, l_2, m_2 \rangle \neq 0$ falls $m_1 = m_2 - 1$
 (und $l_2 = l_1 \pm 1$)

$\langle " | \hat{x} - i\hat{y} | " \rangle \neq 0$ falls $m_1 = m_2 + 1$

Um dies zu zeigen, berechne Matrixelement in Ortsdarstellung und drücke \hat{z} durch Kugelharmonische aus

Dipolauswahlregeln:

Wichtig für die Behandlung von Übergängen zwischen Energieniveaus, z.B. induzierte Emission bzw. Absorption
 (Kap. III.5.2)

Übergangsrate: $\Gamma_{n \rightarrow m} \sim \delta(E_m - E_n \pm \hbar\omega) |\langle m | \hat{V} | n \rangle|^2$

"+" : Emission
 "-" : Absorption

ω : Frequenz der einfallenden Strahlung

Thomas-Reiche-Kuhn Summenregel

Sei \hat{H}_0 der Hamiltonian eines N -Teilchensystems von gebundenen Ladungen mit Eigensystem $\hat{H}_0 |m\rangle = E_m |m\rangle$

Dann gilt:

$$\sum_n (E_n - E_m) |\langle m | \hat{d} \cdot \underline{u}_k(0) | n \rangle|^2$$

$$= \hbar^2 \sum_{i=1}^N \frac{q_i^2 u_{ki}(0) u_{ki}^*(0)}{2m_i}$$

Vereinfachung: $q_i = q$, $u_{ki}(0) = e_{ki}$ Erhartscheite

$$\Rightarrow \sum_n (E_n - E_m) |\langle m | \hat{d} \cdot \underline{e}_k | n \rangle|^2 = \frac{N \hbar^2 q^2}{2m}$$

Zahl der Ladung

masse

Beachte: Die Summenregel ist exakt, man benötigt keine Information über die Zustände $|m\rangle, |n\rangle$

Man benötigt die Summenregel bei der Berechnung des totalen Absorptionsquerschnitts

IV.5. Spontane Emission

Jetzt: voll quantisierte Behandlung des Lichts!

Feld $\underline{E} \rightarrow \hat{\underline{E}}$, \hat{H}_{Dipol} enthält jetzt Quanten
 $\hat{a}_k, \hat{a}_k^\dagger$

Beschreibung des Anfangs- und Endzustandes

Produkte aus dem Anteil des Teilchenhamiltonians
und dem des Feld-Hamiltonians

$$|i\rangle = |n\rangle \otimes |\psi_i^{\text{Photon}}\rangle$$

Eigenzustand von $\hat{H}_{\text{Teilchen}}$
Eigenzustand von \hat{H}_{Feld}

i: initial
f: final

$$|f\rangle = |m\rangle \otimes |\psi_f^{\text{Photon}}\rangle$$

Wir beschreiben $|\psi_{i,f}^{\text{Photon}}\rangle$ durch Fockzustände, d.h. durch
Besetzungszahlen

$$|\psi^{\text{Photon}}\rangle = |n_{k_1}, n_{k_2}, \dots, n_{k_j}, \dots\rangle$$

Besetzungszahl der Moden für verschiedene k
(lasse Polarisation index weg)

Photonen sind Bosonen,

$$\text{d.h. } n_{k_j} = 0, 1, \dots, \infty$$

Behaupte zunächst Absorption eines Photons im Zustand k_j
durch ein Atom:

⇒ Atom geht in Zustand mit höherer Energie

⇒ Das "Photonenbad" verliert ein Teilchen !!

Teilchensystem: $|n\rangle \rightarrow |m\rangle$

Photonensystem: $|n_{k_1}, \dots, n_{k_j}, \dots\rangle \rightarrow |n_{k_1}, \dots, n_{k_j}-1, \dots\rangle$

$$\begin{aligned} \text{Erinnerung: } \hat{a}_{k_1} |n_{k_1}, \dots, n_{k_1}, \dots\rangle \\ = \sqrt{n_{k_1}} |n_{k_1}-1, \dots, n_{k_1}-1, \dots\rangle \end{aligned}$$

Entsprechend Emission:

Atom sendet ein Photon aus (und geht dabei in Zustand niedriger Energie)

$$\text{End-Zustand } |f \text{ Photons}\rangle = |n_{k_1}, \dots, n_{k_1}+1, \dots\rangle$$

$$\begin{aligned} \text{bedeutet } \hat{a}_{k_1}^+ |n_{k_1}, \dots, n_{k_1}, \dots\rangle \\ = \sqrt{n_{k_1}+1} |n_{k_1}, \dots, n_{k_1}+1, \dots\rangle \end{aligned}$$

Berechnung der Übergangrate für spontane Emission eines Cirkularen im Zustand k_1

$$\Gamma_{i \rightarrow f} \sim |\langle f | \hat{V} | i \rangle|^2 \delta(E_f - E_i)$$

Fermi's Goldene Regel

mit $\vec{V} = \int_{\text{Dipol}} \vec{d} \cdot \vec{E}(\vec{r}, t)$

$$= -\vec{d} \cdot \left(i \sum_{\vec{k}'} \left(\frac{\hbar \omega_{\vec{k}'}}{2\epsilon_0} \right)^{\frac{1}{2}} \left(\underline{u}_{\vec{k}'}(0) \hat{a}_{\vec{k}'} - \underline{u}_{\vec{k}'}^*(0) \hat{a}_{\vec{k}'}^\dagger \right) \right)$$

quantisiertes Feld!

$|i\rangle = |n\rangle \otimes |\psi_i^{\text{Photon}}\rangle$
entsprechend $|f\rangle$

Wir spezialisieren den Einfachheit halber auf den Fall, dass $|\psi_i^{\text{Photon}}\rangle$ gleich dem "Vakuumszustand" ist

$|vac\rangle = |0\rangle \equiv |0, 0, \dots, 0, \dots\rangle$
alle Besetzungszahlen Null

Endzustand:

~~$|\psi_f^{\text{Photon}}\rangle$~~ $|\psi_f^{\text{Photon}}\rangle = |1\rangle \equiv |0, 0, \dots, 1, \dots\rangle$
| $n_{\vec{k}}$

Dann:

$\langle f | \vec{V} | i \rangle$

hier wurde die Zerlegung benutzt
 ~~$|i\rangle = |n\rangle \otimes |0\rangle$~~ , $|f\rangle = |m\rangle \otimes |1\rangle$

$$= -\sum_{\vec{k}'} i \left(\frac{\hbar \omega_{\vec{k}'}}{2\epsilon_0} \right)^{\frac{1}{2}} \left[\langle m | \vec{d} \cdot \underline{u}_{\vec{k}'}(0) | n \rangle \langle 1 | \hat{a}_{\vec{k}'} | 0 \rangle - \langle m | \vec{d} \cdot \underline{u}_{\vec{k}'}^*(0) | n \rangle \langle 1 | \hat{a}_{\vec{k}'}^\dagger | 0 \rangle \right]$$

Teilchen-Arten des Matrixelements wie im semi-klassischen Fall!

bedachte: $\hat{a}_{k'}|0\rangle = 0$ für alle k'

$$\Rightarrow \langle f | \hat{V} | i \rangle = i \sum_{k'} \left(\frac{\hbar \omega_{k'}}{2 \epsilon_0} \right)^{\frac{1}{2}} \left[\langle m | \hat{d} \cdot \underline{u}_{k'}^*(0) | n \rangle \langle 1 | \hat{a}_{k'}^+ | 0 \rangle \right]$$

$$\text{bedachte: } \langle 1 | \hat{a}_{k'}^+ | 0 \rangle = \langle \hat{a}_{k'}^+ 0 | \hat{a}_{k'}^+ | 0 \rangle$$

$$= \langle 0 | \hat{a}_{k'} \hat{a}_{k'}^+ | 0 \rangle$$

$$\stackrel{\leq 1}{=} \begin{cases} 1 & \text{für } k' = k \\ 0 & \text{sonst} \end{cases}$$

$$= \delta_{k', k}$$

$$\Rightarrow \langle f | \hat{V} | i \rangle^2 = \frac{\hbar \omega_k}{2 \epsilon_0} \left| \langle m | \hat{d} \cdot \underline{u}_k(0) | n \rangle \right|^2$$

~~Be~~ Hier war die Rechnung besonders einfach, da Ausgangszustand des Vakuum war!

Aber auch im allgemeinen Fall ist für die Emission nur der Teil $\sim \hat{a}_{k'}^+$ und für die Adsorption nur der Teil $\sim \hat{a}_{k'}$ in ~~\hat{V}~~ relevant!

Man erhält dann z.B. für die Emission:

BLUG für die auftauchende Erzeuge / Vorkommt in
Häufigkeitsbild \rightarrow Dynamik

Das Ganze dann statistisch gemittelt \rightarrow Dichtegrade
 \Rightarrow Ratenvergleich

Bemerkung:

Das Phänomen der spontanen Emission und die Beziehung
zur induzierten Emission bzw. Absorption wurde
schon 1917 (!) von Einstein vorhergesagt ^{mit} Plancksatz!

— also vor der Entdeckung vieler Elemente der
modernen Quantenmechanik