Wh: Volle Lagrangefunktion für System aus Strahlungsfeld und geladenen Teilchen (Coulombeichung)

$$\boxed{L_{Full} = \sum_{i=1}^{N} \frac{1}{2} m_i \dot{\underline{r}}_i^2 + \int d\underline{r} \left(\underbrace{\frac{\varepsilon_0}{2} (\dot{\underline{A}})^2}_{\text{transversaler Anteil des elektr. Feldes}} - \frac{1}{2\mu_0} (\nabla \times \underline{A})^2 \right) + \int d\underline{r}\, \underline{j} \cdot \underline{A}(\underline{r}, t) - W_{Coulomb}} \quad (*)$$

$$W_{Coulomb} = \frac{1}{8\pi\varepsilon_0} \underbrace{\sum_{i=1}^{N} \sum_{j \neq i}}_{\sum'_{ij}} \frac{q_i q_j}{|\underline{r}_i - \underline{r}_j|}$$

zeitabhängige Teilchenposition ($\underline{r}_i = \underline{r}_i(t)$)

Nachtrag zur letzten Vorlesung:

~~hier wu~~ hier wurde benutzt:

$$\frac{\varepsilon_0}{2} \int d\underline{r} \, |\underline{E}_{\parallel}(\underline{r}, t)|^2 \overset{\text{Parseval}}{=} \frac{\varepsilon_0}{2} \int d\underline{k} \, |\tilde{\underline{E}}_{\parallel}(\underline{k}, t)|^2$$

mit der Fouriertransformierten $\tilde{\underline{E}}_{\parallel}(\underline{k}, t) = \frac{-i\underline{k}}{\varepsilon_0 k^2} \tilde{\rho}(\underline{k}, t)$

$$= \frac{\varepsilon_0}{2} \int d\underline{k} \, \frac{|\tilde{\rho}(\underline{k}, t)|^2}{\varepsilon_0^2 k^2}$$

Nehme Betrag: man interessiert sich für die (reelle) Energie

Jetzt Übergang zur Hamilton-Funktion (alles noch klassisch!)

Kanonisch konjugierte Impulse

$$p_i = \frac{\partial L_{Full}}{\partial \dot{\underline{r}}_i} = \frac{\partial}{\partial \dot{\underline{r}}_i} \left(\sum_{j=1}^{N} \frac{1}{2} m \dot{\underline{r}}_j^2 + \int d\underline{r} \, \underline{j} \cdot \underline{A} \right)$$

$$\int d\underline{r}\, \underline{j} = \sum_{k=1}^{N} q_k \dot{\underline{r}}_k \, \delta(\underline{r} - \underline{r}_k(t))$$

$$= m \dot{\underline{r}}_i + q_i \underline{A}(\underline{r}_i, t) \quad (1)$$

$$\underline{\Pi}_A = \frac{\partial \mathcal{L}^{Feld}}{\partial \dot{\underline{A}}} = \varepsilon_0 \dot{\underline{A}} = -\varepsilon_0 \underline{E}_{\perp} \quad (2)$$

mit $\mathcal{L}^{Feld}$ (Lagrangedichte) $= \left(\frac{\varepsilon_0}{2} (\dot{\underline{A}})^2 - \frac{1}{2\mu_0} (\nabla \times \underline{A})^2 \right)$

$\Rightarrow$ Hamiltonfunktion (aus Legendretransformation)

$$H = \sum_{i=1}^{N} p_i \dot{\underline{r}}_i + \int d\underline{r} \, \underbrace{\underline{\Pi}_A(\underline{r}, t)}_{-\varepsilon_0 \underline{E}_\perp = \varepsilon_0 \dot{\underline{A}}} \cdot \dot{\underline{A}}(\underline{r}, t) - L_{Full}$$

$$H = \sum_{i=1}^{N} \underline{p}_i \cdot \overbrace{\left(\frac{1}{m}(\underline{p}_i - q_i \underline{A})\right)}^{\text{aus } 1} + \int d\underline{r}\; \varepsilon_0 \Big(\overbrace{\dot{\underline{A}}(\underline{r},t)}^{\text{aus } 2}\Big)^2$$

$$- \sum_{i=1}^{N} \frac{m}{2}\left(\frac{1}{m}(\underline{p}_i - q_i \underline{A})\right)^2 - \int d\underline{r}\; \frac{\varepsilon_0}{2}\left(\dot{\underline{A}}\right)^2 + \int d\underline{r}\; \frac{1}{2\mu_0}\left(\nabla \times \underline{A}\right)^2$$

$$\underbrace{-\int d\underline{r}\; \underline{j} \cdot \underline{A}}_{\sum_{i=1}^{N} q_i \dot{\underline{r}}_i \cdot \underline{A} \overset{1}{=} \sum_{i=1}^{N} q_i \frac{1}{m}(\underline{p}_i - q_i \underline{A})\cdot \underline{A}} + W_{Coulomb}$$

benutze mikroskop. Def. von $\underline{j}$

$$\boxed{H = \sum_{i=1}^{N} \frac{1}{2m}\left(\underline{p}_i - q_i \underline{A}(\underline{r}_i,t)\right)^2 + \int d\underline{r} \left(\frac{\varepsilon_0}{2} \underbrace{\left(\dot{\underline{A}}(\underline{r},t)\right)^2}_{\left(-\underline{E}_\perp(\underline{r},t)\right)^2} + \frac{1}{2\mu_0}\left(\nabla \times \underline{A}(\underline{r},t)\right)^2 \right) + W_{Coulomb}}$$

Klassischer Hamiltonian (!)

mit $W_{Coulomb} = \frac{1}{8\pi\varepsilon_0} \sum_{i=1}^{N} \sum_{j \neq i} \frac{q_i q_j}{|\underline{r}_i - \underline{r}_j|}$

Interpretation:

1. Term: „kinetische Energie" der geladenen Teilchen in Anwesenheit des Vektorpotentials

2. Term: Beitrag der Energiedichte des (transversalen) Strahlungsfeldes

3. Term: Coulomb-Energie

Jetzt Quantisierung:

i,j: Teilchenindizes
k,l: Vektorindizes

$\underline{r}_i \longrightarrow \hat{\underline{r}}_i$, $\underline{p}_i \rightarrow \hat{\underline{p}}_i$ mit $\left[(\hat{\underline{r}}_i)_k, (\hat{\underline{p}}_j)_l\right] = i\hbar\, \delta_{ij}\, \delta_{kl}$

„wie immer"

$(A)_k \rightarrow \underbrace{(\hat{A})_k}_{\hat{A}_k}$, $(\Pi)_k = -\varepsilon_0 (\underline{E}_\perp)_k \longrightarrow (\hat{\Pi})_k = \hat{\Pi}_k$

Erinnerung:

(**) $$\hat{\underline{A}}(\underline{r},t) = \sum_{\underline{k}} \left(\frac{\hbar}{2\omega_k \varepsilon_0}\right)^{\frac{1}{2}} \left(\hat{a}_k \underline{u}_k(\underline{r}) e^{-i\omega_k t} + \hat{a}_k^+ \underline{u}_k^*(\underline{r}) e^{-i\omega_k t}\right)$$

$$\hat{\underline{E}}_\perp(\underline{r},t) = -\dot{\hat{\underline{A}}}(\underline{r},t)$$

mit Vertauschungsrelation $\left[\hat{A}_k(\underline{r},t), \Pi_l(\underline{r}',t)\right] = i\hbar\, \delta^\perp_{kl}(\underline{r}-\underline{r}')$

(s. (z.B.) Schwabl)

$$\text{mit } \delta^\perp_{kl}(\underline{r}-\underline{r}') = \frac{1}{(2\pi)^3}\int d\underline{q}\, e^{i\underline{q}\cdot(\underline{r}-\underline{r}')}\left(\delta_{kl} - \frac{q_k q_l}{q^2}\right)$$

$$= \delta_{kl}\,\delta(\underline{r}-\underline{r}') - \frac{1}{4\pi}\partial_k' \partial_l' \frac{1}{|\underline{r}-\underline{r}'|}$$

„transversale Deltafunktion"

Benutze die obige Relationen zur Umschreibung $\underset{\text{klass. Hamiltonfkt}}{H} \longrightarrow \underset{\text{Hamiltonoperator}}{\hat{H}}$

Benutze dabei, dass nach der Entwicklung von $\hat{\underline{A}}$ in Moden (**) der Feldanteil wie folgt geschrieben werden kann

$$\frac{1}{2}\int d\underline{r} \left(\varepsilon_0 \left(\dot{\hat{\underline{A}}}\right)^2 + \frac{1}{\mu_0}\left(\nabla \times \hat{\underline{A}}\right)^2\right) = \ldots\ldots = \sum_{\underline{k}} \hbar\omega_{\underline{k}} \left(\hat{N}_{\underline{k}} + \frac{1}{2}\right)$$

mit $\hat{N}_{\underline{k}} = \hat{a}^+_{\underline{k}} \hat{a}_k$

Siehe Rechnung für das <u>freie</u> Strahlungsfeld

Gesamtausdruck für den Hamiltonian

$$\hat{H} = \hat{H}_{Teilchen} + \hat{H}_{Feld} + \hat{H}_{Kopplung}$$

mit $$\hat{H}_{Teilchen} = \sum_{i=1}^{N} \frac{\hat{p}_i^2}{2m} + \frac{1}{8\pi\varepsilon_0} \sum_{i=1}^{N} \sum_{j \neq i} \frac{q_i q_j}{|\underline{r}_i - \underline{r}_j|}$$

enthält auch die Coulomb-Energie

$$\hat{H}_{Feld} = \int d\underline{r} \left(\frac{\varepsilon_0}{2} (\dot{\hat{\underline{A}}})^2 + \frac{1}{2\mu_0} (\nabla \times \hat{\underline{A}})^2 \right)$$

$$= \sum_{\underline{k}} \hbar \omega_{\underline{k}} \left(\hat{N}_{\underline{k}} + \frac{1}{2} \right)$$

Beitrag des freien Strahlungsfeldes

$$\hat{H}_{Kopplung} = - \sum_{i=1}^{N} \frac{q_i \hat{\underline{p}}_i \cdot \hat{\underline{A}}(\underline{r}_i, t)}{m} + \sum_{i=1}^{N} \frac{q_i^2 \hat{\underline{A}}^2(\underline{r}_i, t)}{2m}$$

Bemerkung:

- $\underline{A}$ in allen Termen rein transversal (Coulomb-Eichung)
- Bisher haben wir spinlose geladene Teilchen angenommen!

Berücksichtigung des Spins möglich über entsprechenden Term aus dem Pauli-Hamilton

$$\Rightarrow \text{Zusatzterm}: \quad \hat{H}_{spin} = - \sum_{i=1}^{N} \frac{q_i g_i \hbar \hat{\underline{S}}_i \cdot \underline{B}(\underline{r}_i, t)}{2m_i}$$

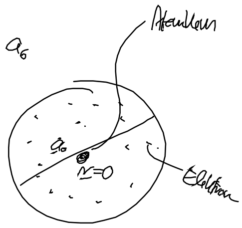
IV.4. Teilchen-Feld-Kopplung in Dipolnäherung

Betrachte den Fall, dass $\hat{H}_{Teilchen}$ ein System gebundener Ladungen beschreibt, also z.B. die Ladungen in Atomen

wichtig in der Atom- und Molekülphysik
Wechselwirkung von Licht und gebundenen Zuständen (Spektroskopie)

IV.4.1. Dipol-Hamiltonian

Annahme: Die Ladungen befinden sich in der Umgebung von $\underline{r}=0$ und sind räumlich lokalisiert in einem Gebiet mit Ausdehnung a_0



Dabei gelte $a_0 \ll \frac{1}{k} = \frac{\lambda}{2\pi}$ — typische Wellenlänge

k: Wellenzahl des Strahlungsfeldes (Licht)

a_0 sei also klein gegenüber der räumlichen Distanz, auf der die Felder $\underline{A}$ und $\underline{E}$ variieren!

$\Longrightarrow$ Approximation im vollen Hamiltonian

Entwickle $\underline{A}(\underline{r},t)$ (in A_{Feld} und $A_{Kopplung}$) um $\underline{r}=0$ und berücksichtige nur den Term nullter Ordnung

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

„long wavelength approximation"

Für spinlose Felder ergibt sich (in Coulombeichung)

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^{N} \frac{\hat{p}_i^2}{2m} + W_{Coulomb} + \sum_{\underline{k}} \hbar\omega_{\underline{k}}\left(\hat{N}_{\underline{k}} + \frac{1}{2}\right) - \sum_{i=1}^{N} \frac{q_i p_i \hat{\underline{A}}(0,t)}{m} + \sum_{i=1}^{N} \frac{q_i^2 \hat{\underline{A}}^2(0,t)}{2m}$$

mit $\hat{N}_{\underline{k}} = \hat{a}^+_{\underline{k}} \hat{a}_{\underline{k}}$

wobei $\hat{a}^+_k, \hat{a}_k$ jetzt durch $\hat{A}(0,t)$ ausgedrückt!

Erinnerung:

$$\hat{\underline{A}}(0,t) = \sum_{\underline{k}} \left(\frac{\hbar}{2\omega_k \varepsilon_0}\right)^{\frac{1}{2}} \left(\hat{a}_{\underline{k}}\, \underline{u}_{\underline{k}}(0)\, e^{-i\omega_k t} + \hat{a}^+_{\underline{k}}\, \underline{u}^*_{\underline{k}}(0)\, e^{i\omega_k t}\right)$$

$$\hat{\underline{E}}_\perp(0,t) = -\dot{\hat{\underline{A}}}(0,t) = \dots$$

$\Longrightarrow$ $\hat{a}_{\underline{k}}, \hat{a}_{\underline{k}}^+$ lassen sich auch durch $\hat{A}, \hat{\underline{E}}_\perp$ ausdrücken!

$\Rightarrow$ die Näherung $\hat{\underline{A}}(\underline{r},t) \approx \hat{\underline{A}}(0,t)$ beeinflusst auch das Strahlungssystem!

$$\Rightarrow \boxed{\hat{H}_{pA} = \sum_{i=1}^{N} \frac{(\underline{p}_i - q_i \underline{A}(0,t))^2}{2m} + \hat{H}_{Feld} + W_{Coulomb}}$$

mit $\hat{H}_{Feld} = \sum_{\underline{k}} \hbar\omega_{\underline{k}} (\hat{N}_{\underline{k}} + \frac{1}{2})$
wobei $\hat{\underline{A}} = \hat{\underline{A}}(0)$!

Im Folgenden unterziehen wir $\hat{H}_{pA}$ einer unitären Transformation
so dass alle Erwartungswerte, Wahrscheinlichkeiten invariant bleiben

Konkret: $\hat{H}_{pA} \longrightarrow \hat{T}\hat{H}_{pA}\hat{T}^+$ mit $\hat{T}\hat{T}^+ = \hat{T}^+\hat{T} = \hat{1}$ unitär

mit $\hat{H}_{pA}$ müssen auch die Zustände $|\psi\rangle$ transformiert werden,
also $|\psi\rangle \rightarrow \hat{T}|\psi\rangle$, damit

$$\langle\psi|\hat{H}_{pA}|\phi\rangle \overset{!}{=} \langle\psi \underbrace{\hat{T}^+\hat{T}}_{\hat{1}} \hat{H}_{pA} \underbrace{\hat{T}^+\hat{T}}_{\hat{1}} \phi\rangle$$

hier: $\hat{T} = e^{-i/\hbar\, \hat{\underline{d}} \cdot \hat{\underline{A}}}$

mit $\hat{\underline{A}} = \hat{\underline{A}}(0,t)$

und $\boxed{\hat{\underline{d}} = \sum_{i=1}^{N} q_i \hat{\underline{r}}_i}$ Operator des Dipolmoments

Auswirkung dieser unitären Transformation auf die einzelnen Terme in $\hat{H}_{pA}$?

Benutze Baker-Hausdorff-Formel

$$e^{\hat{A}z}\hat{B}e^{-\hat{A}z} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{z^n}{n!} [\hat{A},\hat{B}]_n$$ „n-facher Kommutator"

hier $\hat{A}, \hat{B}$ irgendwelche Operatoren

mit $[\hat{A},\hat{B}]_n = [\hat{A}, [\hat{A},\hat{B}]_{n-1}]$

mit $[\hat{A},\hat{B}]_0 = \hat{B}$

im konkreten Fall: $\hat{A} \longrightarrow i/\hbar\, \hat{\underline{d}} \cdot \underline{A}$

$z \longrightarrow 1$

$\hat{B} \rightarrow$ Terme im Hamiltonian $\hat{H}_{kl}$