

Gesamtausdruck für Hamiltonian:

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

$$\text{mit } \hat{H}_{\text{Teilchen}} = \sum_{i=1}^N \frac{\hat{p}_i^2}{2m} + \frac{1}{8\pi\epsilon_0} \sum_{ij} \frac{q_i q_j}{|\hat{r}_i - \hat{r}_j|}$$

$$\hat{H}_{\text{Feld}} = \int dV \left(\frac{\epsilon_0}{2} \underline{\hat{E}}^2 + \frac{1}{2\mu_0} \underline{\hat{B}}^2 \right)$$

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

$$\hat{H}_{\text{Kopplung}} = - \sum_i \frac{q_i \hat{p}_i}{m} \hat{A}_{\perp}(\hat{r}_i) + \sum_i \frac{q_i^2}{2m} \hat{A}_{\perp}^2(\hat{r}_i)$$

(Kopplung: Entwicklung vom Term $(\hat{p}_i - q_i \hat{A}(\hat{r}_i))^2$)

Bemerkung:

Bisher haben wir spinlose geladene Teilchen angenommen
Berücksichtigung des Spins möglich über entsprechenden Term aus dem Pauli-H

$$\Rightarrow \text{zusätz. Term } \hat{H}_{\text{Spin}} = - \sum_{i=1}^N \frac{q_i g_i \hbar \hat{S}_i B(r_i)}{2m_i}$$

IV. 4. Teilchen-Feldkopplung in Dipolnäherung

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

→ wichtig in Atomphysik

(Wechselwirkung von Licht und Teilchen zerstört die Teilchen nicht)

IV. 4.1. Dipolhamiltonian

Annahme: Die Ladungen sitzen in der Umgebung von $\underline{r}=0$ und sind räumlich lokalisiert
auf Gebiet mit Ausdehnung a_0 → typische Wellenlänge des Lichts

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

⇒ a_0 ist klein gegenüber die räumlichen Distanzen, über die die Felder
 \underline{A} und \underline{E} variieren!

⇒ Approximation im vollen Hamiltonian:

entwickle $\underline{A}(\underline{r}, t)$ um $\underline{r}=0$ und berücksichtige nur den Term n ter

Ordnung, also $\underline{A}(\underline{r}, t) = \underline{A}(\underline{r}=0, t) + \dots \Rightarrow \text{long-wavelength approximation}$

Für spinlose Teilchen ergibt sich (mit Coulombbeziehung)

$$\hat{H}_{\text{IA}} = \sum_{i=1}^N \frac{(\hat{p}_i - q_i \hat{A}(0))^2}{2m} + \hat{H}_{\text{Feld}} + W_{\text{Coulomb}}$$

Untersuche \hat{H}_{FA} nun einer unitären Transformation, so dass alle Erwartungswerte invariant bleiben

$$\hat{H}_{FA} \longrightarrow \hat{T} \hat{H}_{FA} \hat{T}^\dagger$$

mit $\hat{T} = e^{-i\hat{H}t/\hbar}$ unitärer Operator, also $\hat{T}^\dagger \hat{T} = \hat{T} \hat{T}^\dagger = \mathbb{1}$

wobei $\hat{d} = \sum_{i=1}^N q_i \hat{r}_i$ der Operator des Dipolmoments ist.

beachte: mit \hat{H} müssen auch die Zustände verschoben werden,

$$|4\rangle \longrightarrow \hat{T} |4\rangle$$

$$\langle 4 | \hat{H} | \emptyset \rangle \stackrel{!}{=} \langle 4 | \hat{T}^\dagger \hat{T} \hat{H} \hat{T}^\dagger \hat{T} | \emptyset \rangle$$

Frage: Auswirkung der unitären Transform auf der einzelnen Terme in \hat{H}_{FA} ?

Benutze Baker-Hausdorff Formel:

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

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

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

$$\hat{T} \hat{r}_i \hat{T}^\dagger = \hat{r}_i \quad (\text{da } [\hat{r}_i, \hat{H}] = 0, \hat{A}(0) \text{ hängt nicht von Teilchenoperatoren ab})$$

$$\hat{T} \hat{A} \hat{T}^\dagger = \hat{A}$$

$$\hat{T} \hat{p}_i \hat{T}^\dagger = e^{-i\hat{H}t/\hbar} \hat{p}_i e^{i\hat{H}t/\hbar}$$

$$[\hat{p}_i, \frac{i}{\hbar} \hat{d} \cdot \hat{A}] = q_i \hat{A}(0, t)$$

$$= \hat{p}_i + q_i \hat{A}(0, t)$$

$$\hat{T}^\dagger \hat{T} = \mathbb{1}$$

$$\begin{aligned} \Rightarrow \hat{T} (\hat{p}_i - q_i \hat{A})^2 \hat{T}^\dagger &= \hat{T} (\hat{p}_i - q_i \hat{A}) (\hat{p}_i - q_i \hat{A}) \hat{T}^\dagger = (\hat{p}_i + q_i \hat{A} - q_i \hat{A})^2 \\ &= \hat{p}_i^2 \end{aligned}$$

Trage des Strahlungsterms?

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

$$T \hat{a}_{\underline{k}}^\dagger T^\dagger = \hat{a}_{\underline{k}}^\dagger + \hat{\lambda}_{\underline{k}}$$

$$\text{mit } \hat{\lambda}_{\underline{k}} = i \sqrt{\frac{1}{2\hbar \omega_{\underline{k}} \epsilon_0}} \hat{U}_{\underline{k}}(\mathbf{0})$$

$$T \hat{a}_{\underline{k}} T^\dagger = \hat{a}_{\underline{k}} + \hat{\lambda}_{\underline{k}}^*$$

$$T \hat{a}_{\underline{k}}^\dagger \hat{a}_{\underline{k}} T^\dagger = (\hat{a}_{\underline{k}}^\dagger + \hat{\lambda}_{\underline{k}}) (\hat{a}_{\underline{k}} + \hat{\lambda}_{\underline{k}}^*) = \hat{a}_{\underline{k}}^\dagger \hat{a}_{\underline{k}} + \hat{\lambda}_{\underline{k}}^* \hat{a}_{\underline{k}} + \hat{\lambda}_{\underline{k}} \hat{a}_{\underline{k}}^\dagger + |\hat{\lambda}_{\underline{k}}|^2$$

Aus dem ursprünglichen Feldterm haben wir insgesamt vier Beiträge

- 1 $\sim \hat{a}_{\underline{k}}^\dagger \hat{a}_{\underline{k}}$
- 2 $\sim \hat{\lambda}_{\underline{k}} \hat{a}_{\underline{k}} + \hat{\lambda}_{\underline{k}}^* \hat{a}_{\underline{k}}^\dagger$
- 3 $\sim |\hat{\lambda}_{\underline{k}}|^2$

Erinnerung:
$$\hat{A}(\underline{r}, t) = \sum_{\underline{k}} \left(\frac{\hbar}{2\omega_{\underline{k}} \epsilon_0} \right)^{1/2} \left(\hat{a}_{\underline{k}} \underline{u}_{\underline{k}}(\underline{r}) e^{-i\omega_{\underline{k}} t} + \hat{a}_{\underline{k}}^\dagger \underline{u}_{\underline{k}}^*(\underline{r}) e^{i\omega_{\underline{k}} t} \right)$$

Der neue Hamiltonian hat damit die Terme

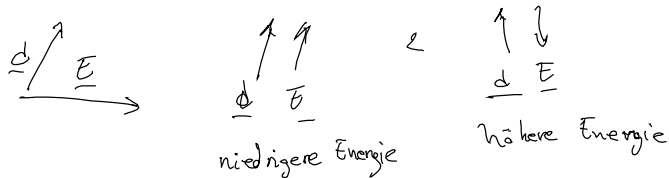
$$\hat{H}_{\underline{dE}} = \underbrace{\sum_{i=1}^N \frac{\hat{p}_i^2}{2m}}_{T(\hat{H}_{\text{Teilchen}} + \hat{H}_{\text{Koppl}}) T^\dagger} + \underbrace{\hat{H}_{\text{Feld}} + \hat{H}_{\text{Dipol}} + \sum_{\underline{k}} \frac{(\hat{d} \cdot \underline{u}_{\underline{k}}(\mathbf{0}))^2}{2\epsilon_0}}_{T \hat{H}_{\text{Feld}} T^\dagger}$$

mit
$$\hat{H}_{\text{Feld}} = \sum_{\underline{k}} \hbar \omega_{\underline{k}} (\hat{a}_{\underline{k}}^\dagger \hat{a}_{\underline{k}} + \frac{1}{2}) \quad (\text{wie der alte } \hat{H}_{\text{Feld}}!)$$

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

$$= -\hat{d} \cdot \underbrace{\left(i \sum_{\underline{k}} \left(\frac{\hbar \omega_{\underline{k}}}{2\epsilon_0} \right)^{1/2} (\underline{u}_{\underline{k}}(\mathbf{0}) \hat{a}_{\underline{k}} - \underline{u}_{\underline{k}}^*(\mathbf{0}) \hat{a}_{\underline{k}}^\dagger) \right)}_{\text{entspricht } -\dot{\hat{A}}(\mathbf{0}) = \underline{E}(\mathbf{0})}$$

$$= -\hat{d} \cdot \hat{E}$$



Bemerkungen

- H_{SE} hat physikalisch plausible Struktur
 - $\hat{H}_{Teilchen}$ und $\hat{W}_{Coulomb}$: System von gebundenen Teilchen (z.B. Wasserstoffatom)
 - \hat{H}_{Feld} : reines (transversales) Strahlungsfeld
 - \hat{H}_{Dipol} : repräsentiert die Kopplung an quantenmechanisches \underline{E} -Feld (im Rahmen von einer "semiklassische" Behandlung werden die Operatoren $\hat{a}_k, \hat{a}_k^\dagger$ zu Zahlen a_k, a_k^*)
 - Korrekturterm ("Dipolare Selbstenergie")
Bei 2-Niveau-Systeme $d^2 a^2 / \epsilon_0 \hbar$, also eine globale Energie-Verschiebung

Erinnerung

Grundlage der Konstruktion des "Dipol-Hamiltonian" war die Approximation

$$\hat{A}(\underline{r}, t) \simeq \underline{A}(0, t)$$

Das Mitnehmen höherer Terme (linear, quadratisch in \underline{r}) würde zu multipolaren Kopplungen führen!

IV 4.2. Matrixelemente in Dipolnäherung

Aus Basis der konstruierten Hamiltonians können wir der Einfluss von Strahlung auf ungestörte, gebundene Zustände im Sinne der Störungstheorie behandeln

⇒ Wir benötigen die Matrixelemente der Kopplung ($\hat{H}_{Dipol} + \text{Korrektur}$) in den Eigenzuständen des reinen Teilchensystems ($\hat{H}_{Teilchen} + \hat{W}_{Coulomb}$)

Betrachte zunächst den "semiklassische" Fall.

- $|n\rangle$ ungestörte Zustände (z.B. Wasserstoffatom Zustände)

$$\cdot \underline{\hat{d}} \underline{E}$$

$$\rightarrow \langle m | \underline{\hat{d}} | n \rangle \underline{E} \Rightarrow \text{Auswahlregeln} \quad \begin{array}{l} - |m\rangle \\ - |m-1\rangle \\ - |m-2\rangle \\ - |m-3\rangle \end{array}$$

↑
manche Kopplungen nicht möglich
Kopplungen ↓