Gesamtausdruck für Hamiltonian:

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

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

$$\hat{H}_{Feld} = \int dv \left(\frac{\varepsilon_0}{2} \hat{\underline{E}}_\perp^2 + \frac{1}{2\mu_0} \hat{\underline{B}}^2 \right)$$

$$= \sum_k \hbar\omega_k \left(\hat{N}_k + \frac{1}{2} \right)$$

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

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

Bemerkung:

Bisher haben wir spinlose geladene Teilchen angenommen

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

$\Rightarrow$ zusatz Term $$\hat{H}_{spin} = -\sum_{i=1}^{N} \frac{q_i g_i \hbar \hat{S}_i B(\underline{r}_i)}{2m_i}$$

IV. 4. Teilchen-Feld Kopplung in Dipolnäherung

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

$\rightarrow$ 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 $\rightarrow$ typische Wellenlänge des Lichts

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

$\Rightarrow$ a_0 ist klein gegenüber die räumlichen Distanzen, über die die Feldern $\underline{A}$ und $\underline{E}$ variieren!

$\Rightarrow$ Approximation im vollen Hamiltonian:

entwickle $\underline{A}(\underline{r},t)$ um $\underline{r}=0$ und berücksichtige nur den Term nullter Ordnung, also $\underline{A}(\underline{r},t) = \underline{A}(\underline{r}=0,t) + \ldots$ $\Rightarrow$ Long-wavelength approximation

Für spinlose Teilchen ergibt sich (mit Coulombeichung)

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

Unterziehe $\hat{H}_{PA}$ nun einer unitärer Trafo, so dass alle Erwartungswerte invariant bleiben

$$\hat{H}_{PA} \longrightarrow \hat{T}\,\hat{H}_{PA}\,\hat{T}^{+}$$

mit $\hat{T} = e^{-i/\hbar\, \underline{\hat{d}}\,\underline{\hat{A}}}$ unitärer Operator, also $\hat{T}^{+}\hat{T} = \hat{T}\hat{T}^{+} = \hat{\mathbb{1}}$

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

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

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

$$\langle\psi|\hat{H}|\phi\rangle \stackrel{!}{=} \langle\psi|\hat{T}^{+}\,\hat{T}\,\hat{H}\,\hat{T}^{+}\,\hat{T}|\phi\rangle$$

Frage: Auswirkung der unitären Trafo auf die einzelnen Terme in H_{PA}?

Benutze Baker-Hausdorff Formel:

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

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

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

$\hat{T}\underline{\hat{r}}_i\hat{T}^{+} = \underline{\hat{r}}_i$ (da $[\hat{r}_i,\hat{r}_j] = 0$, $\hat{A}(0)$ hängt nicht von Teilchenoperatoren ab)

$$\hat{T}\,\underline{\hat{A}}\,\hat{T}^{+} = \underline{\hat{A}}$$

$$\hat{T}\,\underline{\hat{p}}_i\,\hat{T}^{+} = e^{-i/\hbar\,\underline{\hat{d}}\,\underline{\hat{A}}}\,\underline{\hat{p}}_i\,e^{i/\hbar\,\underline{\hat{d}}\,\underline{\hat{A}}} \qquad [\underline{\hat{p}}_i, \tfrac{i}{\hbar}\underline{\hat{d}}\,\underline{\hat{A}}] = q_i\,\underline{\hat{A}}(0,t)$$

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

$$\Rightarrow \hat{T}(\underline{\hat{p}}_i - q_i\underline{\hat{A}})^2\hat{T}^{+} = \hat{T}(\underline{\hat{p}}_i - q_i\underline{\hat{A}})\overset{T^{+}T=\mathbb{1}}{\vee}(\underline{\hat{p}}_i - q_i\underline{\hat{A}})\hat{T}^{+} = (\underline{\hat{p}}_i + q_i\underline{\hat{A}} - q_i\underline{\hat{A}})^2$$

$$= \underline{\hat{p}}_i^{2}$$

Trafo des Strahlungsterms?

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

$$T\,\hat{a}_k^\dagger\, T^\dagger = \hat{a}_k^\dagger + \hat{\lambda}_{\underline{k}} \qquad \text{mit } \hat{\lambda}_{\underline{k}} = -i\sqrt{\frac{1}{2\hbar\omega_k\varepsilon_0}}\;\hat{\underline{d}}\,\underline{u}_{\underline{k}}(0)$$

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

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

Aus dem ursprünglichen Feldterm haben wir insgesamt vier Beiträge

$1 \sim a_{\underline{k}}^\dagger a_{\underline{k}}$

$2 \sim \underline{d}\,\underline{u}_{\underline{k}}(0)\, a_k^\dagger$

$1 \sim (\underline{d}\,\underline{u}_k(0))^2$

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

Der neue Hamiltonian hat damit die Terme

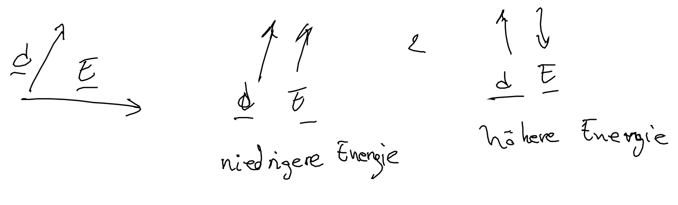
$$H_{\underline{d}E} = \underbrace{\sum_{i=1}^{N} \frac{\hat{\underline{p}}_i^2}{2m} + W_{coulomb}}_{T(\hat{H}_{Teilchen} + \hat{H}_{Kopplung})T^\dagger} + \underbrace{\hat{H}_{Feld} + \hat{H}_{Dipol} + \sum_{\underline{k}} \frac{(\hat{\underline{d}}\,\underline{u}_k(0))^2}{2\varepsilon_0}}_{T\,\hat{H}_{Feld}\,T^\dagger}$$

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

$$\hat{H}_{Dipol} = -i \sum_{\underline{k}} \left(\frac{\hbar\omega_k}{2\varepsilon_0}\right)^{\frac{1}{2}} \hat{\underline{d}} \left(\underline{u}_k(0)\,\hat{a}_{\underline{k}} - \underline{u}_{\underline{k}}^*(0)\,\hat{a}_{\underline{k}}^\dagger\right)$$

$$= -\hat{\underline{d}}\, \underbrace{\left(i \sum_{\underline{k}} \left(\frac{\hbar\omega_k}{2\varepsilon_0}\right)^{1/2} \left(\underline{u}_{\underline{k}}(0)\,\hat{a}_{\underline{k}} - \underline{u}_{\underline{k}}^*(0)\,\hat{a}_{\underline{k}}^\dagger\right) \right)}_{\text{entspricht } -\dot{\hat{\underline{A}}}(0) \,=\, \underline{E}(0)}$$

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



Bemerkungen

- H_{QE} hat physikalisch plausible Struktur
  - $\hat{H}_{Teilchen}$ und $\hat{W}_{Coulomb}$: System von gebundene 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 $\hat{a}_k$ $\hat{a}_k^+$ zu zahlen a_k, a_k^*)
  - Korrekturterm ("Dipolare Selbstenergie") Bei 2-Niveau-Systeme $d^2 \propto \mathbb{1}$, also eine globale Energie-Verschiebung

Erinnerung

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

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

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

IV 4.2. Matrixelemente in Dipolnäherung

Aus Basis der konstruierten Hamiltonians können wir der Einfluss von Strahlung auf ungestörten, gebundenen Zustände im Sinne de Störungstheorie behandeln

$\Rightarrow$ Wir benötigen die Matrixelemente de Kopplung ($\hat{H}_{Dipol}$ + Korrektur) in den Eigenzuständen des reinen Teilchensystem ($\hat{H}_{Teilchen} + \hat{W}_{Coulomb}$)

Betrachte zunächst den "semiklassische" Fall.

- $|n\rangle$ ungestörte Zustände (z.B. Wasserstoffatom Zustände)
- $-\underline{\hat{d}}\,\underline{E}$

$\longrightarrow$ $\langle m| -\underline{\hat{d}} |n\rangle \, \underline{E} \Longrightarrow$ Auswahlsregeln

$\updownarrow$

manche Kopplungen nicht möglich