

Absorption und Emission in voll quantisierter Beschreibung (Stromyottheorie)

$$\hat{H}_{\text{Teilchen}} = \sum_i \frac{\hat{p}_i^2}{2m_i} + W_{\text{Coulomb}}$$

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

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

$$\vec{d} = \sum_{i=1}^N q_i \vec{r}_i$$

semi-klassisch:  $\vec{d}$  ist Operator;  $\hat{a}_{\underline{y}}, \hat{a}_{\underline{y}}^\dagger$  sind Zahlen!

voll quantisiert:  $\hat{a}_{\underline{y}}, \hat{a}_{\underline{y}}^\dagger$  Variablen bzw. Operatoren

Übergangsrate:

$$\Gamma_{i \rightarrow f} \sim |\langle f | \hat{V} | i \rangle|^2 \delta(E_f - E_i), \quad \hat{V} = \hat{H}_{\text{Dipol}} \quad \text{Vegels!}$$

"initial"      "final"

(ungerade)  
Zustände:

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

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

Eigenzustände  
von  $\hat{H}_{\text{Teilchen}}$

Eigenzustände von  $\hat{H}_{\text{Feld}}$

Fockzustände mit  $n_{\underline{k}} = 0, 1, \dots, \infty$   
Bosonen

Absorption eines Photons

$$|\psi_i^{\text{Photon}}\rangle \rightarrow |\psi_f^{\text{Photon}}\rangle = |n_{\underline{k}_1}, \dots, n_{\underline{k}_1}-1, \dots\rangle$$

Absorption eines Quants  
~~mit~~ im Zustand  $\underline{k}_1$ !

$$|n\rangle \rightarrow |m\rangle \text{ mit } E_m > E_n$$

angeregter  
Zustand

Gesamtenergie des Systems Teilchen + Feld im Falle der Absorption

$$E_i = E_n + \sum_{\underline{k}'} \hbar \omega_{\underline{k}'} (N_{\underline{k}'} + \frac{1}{2})$$

$$E_f = E_m + \sum_{\underline{y}_i} \hbar \omega_{\underline{y}_i} (N_{\underline{y}_i} + \frac{1}{2}) - \hbar \omega_{\underline{y}_k}$$

Energie des absorbierter Photons

$$\Rightarrow E_f - E_i = E_m - E_n - \hbar \omega_{\underline{y}_k}$$

$\hbar \omega_{\underline{y}_k} = \hbar k c = c p$   
Photon-Dispersionsrelation

Emission:

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

wie vorher

$$|f\rangle = |m\rangle \otimes |\psi_f^{\text{Photon}}\rangle \quad \text{mit} \quad |\psi_f^{\text{Photon}}\rangle = |n_{\underline{y}_1}, \dots, n_{\underline{y}_k} + 1, \dots\rangle$$

$$E_i = E_n + \sum_{\underline{y}_i} \hbar \omega_{\underline{y}_i} (N_{\underline{y}_i} + \frac{1}{2})$$

$$E_f = E_m + \sum_{\underline{y}_i} \hbar \omega_{\underline{y}_i} (N_{\underline{y}_i} + \frac{1}{2}) + \hbar \omega_{\underline{y}_k}$$

$$E_m < E_n \quad , \quad E_f - E_i = E_m - E_n + \hbar \omega_{\underline{y}_k}$$

Nun zu den Übergangsraten (Fermi's Golden Rule)

$$\Gamma_{i \rightarrow f} \sim \langle f | \hat{V} | i \rangle^2 \delta(E_f - E_i) \quad , \quad \hat{V} = \hat{H}_{\text{Dipol}}$$

Betrachte zunächst den Fall der Emission, wobei das Strahlungsfeld vor der Emission im Vakuumzustand war

$$\text{d.h. } |i\rangle = |n\rangle \otimes |vac\rangle \quad \text{mit } |vac\rangle = |0\rangle \equiv |0, 0, 0, \dots, 0\rangle$$

↑  
Vakuum

Fockzustand mit verschwindenden Besetzungszahlen

$$|f\rangle = |m\rangle \otimes |1\rangle$$

$$\text{mit } |1\rangle \equiv |0, 0, \dots, 1, \dots\rangle = \hat{a}_{\underline{y}_k}^\dagger |0\rangle$$

$n_{\underline{y}_k}$

also Emission eines Photons im Zustand  $\underline{y}_k$ ,  
Energie  $\hbar \omega_{\underline{y}_k} = \hbar c |\underline{y}_k|$

$$\hat{A}_{\text{Dipol}} = -i \sum_{\underline{y}} \frac{\text{tr}(\underline{y})}{|\underline{y}|} \left( \hat{a}_{\underline{y}} \vec{d} \cdot \underline{y} \right)$$

$$\left( \hat{a}_{\underline{y}_k} \cdot \underline{y}_k \right) \hat{a}_{\underline{y}_k} - \hat{a}_{\underline{y}_k}^\dagger \cdot \underline{y}_k \hat{a}_{\underline{y}_k}^\dagger$$

Matrixelement:

$$\langle f | \hat{V} | i \rangle = -i \sum_{\underline{y}'} \left( \frac{\hbar \omega_{\underline{y}'}}{2\epsilon_0} \right)^{\frac{1}{2}} \left[ \begin{array}{c} \text{Teilmatrix} \\ \langle m | \hat{d} \cdot \underline{y}_{\underline{y}'}(0) | n \rangle \end{array} \begin{array}{c} \text{Feldanteil} \\ \langle 1 | \hat{a}_{\underline{y}'} | 0 \rangle \\ - \langle m | \hat{d} \cdot \underline{y}_{\underline{y}'}^*(0) | n \rangle \langle 1 | \hat{a}_{\underline{y}'}^+ | 0 \rangle \end{array} \right]$$

Durch die Faltung von  $|i\rangle$  und  $|f\rangle$  in Teilchen- und Feldanteil fassen sich die Matrixelement in Teilchen- und Feldanteil!

Beacht:  $\langle 1 | a_{\underline{y}} | 0 \rangle = \langle a_{\underline{y}}^+ | 0 | \hat{a}_{\underline{y}} | 0 \rangle = 0$  !

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

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

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

1 für  $\underline{k}' = \underline{k}$   
0 sonst

nur Term mit  $\underline{k}' = \underline{k}$  überlebt!

$$\langle f | \hat{V} | i \rangle = \left( \frac{\hbar \omega_{\underline{y}'}}{2\epsilon_0} \right)^{\frac{1}{2}} \langle m | \hat{d} \cdot \underline{y}_{\underline{y}'}^*(0) | n \rangle$$

Allgemeiner: Betrachte nun den Fall, dass das Strahlungsfeld vorher nicht im Vakuumzustand war!

Betrachte zunächst Absorption (einige Photonen im Zustand  $\underline{y}$ )

$$|i\rangle = |n\rangle \otimes | \dots n_{\underline{y}} \dots \rangle$$

$$|f\rangle = |m\rangle \otimes | \dots n_{\underline{y}} - 1 \dots \rangle$$

$$\frac{1}{\sqrt{n_{\underline{y}}}} \hat{a}_{\underline{y}} | \dots n_{\underline{y}} \dots \rangle$$

Berechnung Matrixelement  $\langle f | \hat{V} | i \rangle$

Es entstehen Terme der Form  
(folgt aus auf Strahlenganteil)

$$\sum_{\underline{y}'} (\langle f | \hat{a}_{\underline{k}} | i \rangle - \langle f | \hat{a}_{\underline{k}}^\dagger | i \rangle)$$

$$\sim \langle \dots n_{\underline{k}} - 1 \dots | \hat{a}_{\underline{y}} | \dots n_{\underline{k}} \dots \rangle$$

$$\sim \langle \dots n_{\underline{k}} - 1 \dots | \hat{a}_{\underline{y}}^\dagger | \dots n_{\underline{k}} \dots \rangle$$

$$\sim \langle \dots n_{\underline{k}} - 1 \dots | \dots n_{\underline{k}} \dots n_{\underline{k}+\underline{e}_i} \dots \rangle$$

$$\sqrt{n_{\underline{k}}} \delta_{\underline{y}, \underline{k}}$$

Orthogonalität der Fockzustände zu verschiedenen  $\underline{y}, \underline{y}'$

Nur der Beitrag aus dem Vernichtungsoperator ist relevant!

Übergangsrat

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

$$\sim |\langle m | \hat{d} \cdot \underline{u}_{\underline{y}}(0) | n \rangle|^2 n_{\underline{k}} \delta(E_m - E_n - \hbar \omega_{\underline{y}})$$

(mittlere) Besetzungszahl von Photonen im Zustand  $\underline{y}$

Analoge Rechnung zur Emission

$$|i\rangle = |n\rangle \otimes | \dots n_{\underline{k}} \dots \rangle$$

$$|f\rangle = |m\rangle \otimes | \dots n_{\underline{k}+1} \dots \rangle$$

$$\Rightarrow \langle f | \hat{a}_{\underline{k}} | i \rangle \sim \langle \dots n_{\underline{k}+1} \dots | \hat{a}_{\underline{y}} | \dots n_{\underline{k}} \dots \rangle = 0$$

$$\langle f | \hat{a}_{\underline{k}}^\dagger | i \rangle \sim \langle \dots n_{\underline{k}+1} \dots | \hat{a}_{\underline{y}}^\dagger | \dots n_{\underline{k}} \dots \rangle$$

$$\sim \sqrt{n_{\underline{k}+1}} \langle \dots n_{\underline{k}} \dots n_{\underline{k}+1} \dots \rangle$$

$$\delta_{\underline{k}, \underline{k}'} \sqrt{n_{\underline{k}+1}}$$

Nur der Betrag aus dem Erzeugoperator ist relevant!

$$\Gamma_{i \rightarrow f}^{\text{Emission}} \sim |\langle m | \underline{d} \cdot \underline{u}_Y^*(\omega) | n \rangle|^2 (n_K + 1) \underbrace{\delta(E_f - E_i)}_{\delta(E_m - E_n + \hbar\omega)}$$

Vergleich der Ausdrücke für Absorption und Emission

z.B.  $\underline{u}_Y(\omega) = \underline{e}_x$   $\hookrightarrow$  Einheitsvektor in  $x$ -Richtung  
 $= \underline{u}_Y^*(\omega)$

Man sieht:

- $\Gamma_{i \rightarrow f}^{\text{Absorption}} \sim n_K$ ,  $\Gamma_{i \rightarrow f}^{\text{Emission}} \sim n_K + 1$

Die Raten für Absorption und Emission unterscheiden sich in ihrer Abhängigkeit von der Besetzungszahl  $n_K$

• Das ist eine Folge der Quantisierung des Lichts!

In einem semiklassischen Beschreibungs ( $\hat{a}_Y, \hat{a}_Y^\dagger$  sind Zahlen, Zustände beziehen sich nur auf Feldsysteme) lautet dieser Unterschied nicht auf!

• Spontane Emissionsrate:

Der Anteil, der sich durch die "+1" ergibt, hängt offensichtlich nicht von der Photondichte ab!

$$\Gamma_{i \rightarrow f}^{\text{Emission}} \sim \left( |\langle m | \underline{d} \cdot \underline{u}_Y(\omega) | n \rangle|^2 n_K \delta(\dots) + \underbrace{|\langle m | \underline{d} \cdot \underline{u}_Y^*(\omega) | n \rangle|^2 \delta(\dots)}_{\text{unabhängig von } n_K!} \right) \leftarrow \text{Mandamental auch als "induzierte Emission" bezeichnen}$$

Dieser Anteil (der offensichtlich auch dann existiert, falls kein Strahlungsfeld vorhanden) bezeichnet man als "spontane Emission" d.h.  $|f\rangle = |vac\rangle$

- Die ganz-hergeleitete Emissionsrate ( $\sim N_{k+1}$ ) beschreibt also die totale Emission:

Zum Vergleich: Einsteinsche Theorie der Absorption und Emission von Photonen (1917 !!)

Es sei  $N_k$  die mittlere Gesamtzahl von Photonen im Zustand  $k$ .

Wir betrachten die zeitl. Änderung von  $N_k$  bei einer Absorption oder Emission eines Lichtquants durch ein Atom.

Ansatz:  
 Partengleichung! ①  $\left(\frac{dN_k}{dt}\right)_{\text{Abs}} = -B N_k P_n$  Wahrscheinlichkeit, ein Atom im Zustand  $k+1$  (Anfangszustand) zu finden

Koeffizient, positiv, ansatz Zumindest unbestimmt

induzierte Emission

②  $\left(\frac{dN_k}{dt}\right)_{\text{ind-Em}} = +B N_k P_m$  Wahrsch., ein Atom im Zustand  $k$  (Endzustand) zu finden

Es gilt: Im thermischen Gleichgewicht sind die Atome im Anfang- und Endzustand Boltzmann-verteilt.

$$\frac{P_m}{P_n} = \frac{e^{-E_m/k_B T}}{e^{-E_n/k_B T}}$$

Wegen  $E_m > E_n$  folgt  $P_m < P_n \rightarrow \frac{P_m}{P_n} < 1$

Folgerung:  $\left(\frac{dN_k}{dt}\right)_{\text{Abs}} + \left(\frac{dN_k}{dt}\right)_{\text{ind-Em}} \stackrel{\text{①+②}}{=} B N_k \underbrace{(-P_n + P_m)}_{< 0} \neq 0$

Im thermischen Gleichgewicht würde man aber erwarten, dass  $\frac{dN_k}{dt} \stackrel{\text{insgesamt}}{=} 0$  !

→ es fehlt etwas, nämlich eine weitere Komponente zur Emission!

$$\textcircled{3} \left( \frac{dN_k}{dt} \right)_{\text{spont-Em}} = A P_m \quad \text{Koeffizient}$$

unabhängig von der Zahl der vorhandenen Atome im Endzustand!!  
(anders als bei  $\left( \frac{dN_k}{dt} \right)_{\text{ind-Em}}$ )

Kombiniere

$$\textcircled{1} + \textcircled{2} + \textcircled{3} : \left( \frac{dN_k}{dt} \right)_{\text{Abs}} + \left( \frac{dN_k}{dt} \right)_{\text{ind-Em}} + \left( \frac{dN_k}{dt} \right)_{\text{spont-Em}} \stackrel{!}{=} 0$$

im thermischen Gleichgewicht

$$\Leftrightarrow B N_k (P_m - P_n) + A P_m = 0 \quad \textcircled{*}$$

benutze für  $N_k$  das Ergebnis aus der Bose-Einstein-Statistik:

Photonen sind Bosonen  
mit chemischem Potential  $\mu = 0$

$$N_k = \frac{1}{e^{\frac{h\nu_k}{k_B T}} - 1}$$

$$\text{mit } h\nu_k = \hbar c |k| = c|p|$$

$$\stackrel{!}{=} E_m - E_n$$

Kombiniere alles:

Ergebnis  $\textcircled{*}$  wird gelöst durch  $A=B$

$$\Rightarrow \text{totale Emissionsrate: } \left( \frac{dN_k}{dt} \right)_{\text{ind-Em}} + \left( \frac{dN_k}{dt} \right)_{\text{spont-Em}}$$

$$= B N_k P_m + A P_m$$

$$\stackrel{B=A}{=} A P_m (N_k + 1)$$

Die Probabilität zu  $(N_y + 1)$  ist analog zu unserer Ergebnis  
aus Fermi's Goldene Regel

---