Kopplung zw. Teilchen und Feldern

Klassisch:

Lagrange-Fkt. für Teilchen im elektromagnet. Feld (q Ladung)

$$L = \frac{1}{2} m \dot{\underline{r}}^2 - q\,\phi(\underline{r},t) + q\,\dot{\underline{r}} \cdot \underline{A}(\underline{r},t)$$

$$\frac{d}{dt}\frac{\partial L}{\partial \dot{r}_k} - \frac{\partial L}{\partial r_k} = 0 \quad \Longrightarrow \quad \underbrace{m\ddot{\underline{r}}}_{\text{BWGL}} = q\,\underbrace{\underline{E}(\underline{r},t)}_{-\nabla\phi - \dot{\underline{A}}} + q\,(\dot{\underline{r}} \times \underbrace{\underline{B}(\underline{r},t)}_{\nabla\times A})$$

Hamilton-Funktion: $H = \underline{p}\cdot\dot{\underline{r}} - L \;, \quad \underline{p} = \frac{\partial L}{\partial \dot{\underline{r}}} = m\dot{\underline{r}} + q\underline{A}$

$$= \dots = \frac{1}{2m}(\underline{p} - q\underline{A})^2 + q\,\phi$$

Viele Teilchen: $L = \sum_{i=1}^{N} \frac{1}{2} m \dot{\underline{r}}_i^2 + \int d\underline{r}\, \left[-\rho(\underline{r},t)\,\phi(\underline{r},t) + \underline{j}(\underline{r},t)\underline{A}(\underline{r},t) \right]$

$$\rho(\underline{r},t) = \sum_i q_i\, \delta(\underline{r} - \underline{r}_i(t))$$

$$\underline{j}(\underline{r},t) = \sum_i q\, \dot{\underline{r}}_i(t)\, \delta(\underline{r} - \underline{r}_i(t))$$

Kopplung an das Strahlungsfeld:

Addiere den Beitrag der Lagrangedichte des (freien) Strahlungsfeldes dazu

$$\Rightarrow L_{voll} = \sum_{i=1}^{N} \frac{1}{2} m \dot{\underline{r}}_i^2 + \int d\underline{r}\, \underbrace{\left(\frac{\varepsilon_0}{2} (\overbrace{\nabla\phi + \dot{\underline{A}}}^{\underline{E}^2})^2 - \frac{1}{2\mu_0} (\overbrace{\nabla\times\underline{A}}^{\underline{B}^2})^2 \right)}_{\mathcal{L}_{Feld}}$$

(*) $$+ \int d\underline{r}\, \left(\rho(\underline{r},t)\,\phi(\underline{r},t) - \underline{j}(\underline{r},t)\cdot\underline{A}(\underline{r},t) \right)$$

Beachte:

Die Variablen dieser Lagrangefunktion L_{voll} sind jetzt die Koordinaten der bewegten Teilchen, $\underline{r}_i(t)$ und die Felder $\phi(\underline{r},t)$, $A_k(\underline{r},t)$ mit $k = 1,2,3$

Aufteilung von L_{voll}

$$L_{voll} = L_{Teilchen} + L_{Feld} + L_{Kopplung}$$

mit $L_{Teilchen} = \sum_{i=1}^{N} \frac{1}{2} m \dot{\underline{r}}_i^2$ nicht-relativistisch

$$L_{Feld} = \int d\underline{r}\, \mathcal{L}_{Feld} = \int d\underline{r} \left(\frac{\varepsilon_0}{2}(\nabla\phi + \dot{\underline{A}})^2 - \frac{1}{2\mu}(\nabla \times \underline{A})^2 \right)$$

$$L_{Kopplung} = \int d\underline{r} \left(-\rho(\underline{r},t)\,\phi(\underline{r},t) + \underline{j}(\underline{r},t)\cdot\underline{A}(\underline{r},t) \right)$$

Bemerkungen

- Die Euler-Lagrange-Gl. bzgl. $\underline{r}_i$, $\dot{\underline{r}}_i$ und $\tilde{L} = L_{Teilchen} + L_{Kopplung}$ führen (wie gehabt!) auf die BWGL mit Lorentzkraft
- Die Euler-Lagrange-Gl. bzgl. ϕ, A_k (und den Ableitungen) mit $\hat{\tilde{L}} = L_{Feld} + L_{Kopplung}$ führen auf die Maxwell-Gl.!

Zugehörige Hamiltonfunktion → Hamiltonoperator?

im Prinzip klar:
- Berechnung konjugierter Impulse
- Hamiltondichte/funktion (Legendretransformation)
- Quantisierung kanonisch konjugierter Größe (Korrespondenzprinzip)

Vorher

Vereinfachung:

Wir schreiben L_{voll} zunächst etwas um, wobei wir direkt die Coulomb-Eichung benutzen (~~vorher~~ bisher war L_{voll} unabhängig von der Eichung)

Zeige: Das führt auf eine Eliminierung irrelevanter dynamischer Variablen!

Gängige Strategie bei der Behandl. von Licht-Materie-Wechselwirkung

Idee: Wir spalten die Felder $\underline{E}, \underline{B}$ jeweils in einen longitudinalen und transversalen Anteil auf (bzgl. des Wellenvektors $\underline{k}$)

z.B. $\underline{E}(\underline{r}) \sim \underbrace{\underline{E}(\underline{k})e^{i\underline{k}\cdot\underline{r}}}_{\text{eine Fouriermode}}$

$$\Rightarrow \underline{E}(\underline{k}) = \underline{E}_{\parallel}(\underline{k}) + \underline{E}_{\perp}(\underline{k}) \quad \text{mit} \quad \underline{E}_{\parallel}(\underline{k}) = \frac{(\underline{E}\cdot\underline{k})}{k} \cdot \underbrace{\frac{\underline{k}}{k}}_{\text{Einheitsvektor in } \underline{k}\text{-Richtg}}$$

und $\underline{E}_{\perp}(\underline{k}) = \underline{E} - \underline{E}_{\parallel}(\underline{k})$

$k = |\underline{k}|$

analog für $\underline{B}(\underline{k}) = \underline{B}_{\parallel}(\underline{k}) + \underline{B}_{\perp}(\underline{k})$

Maxwell-Gl.:

$$\nabla \cdot \underline{B} = 0 \Longleftrightarrow \underline{k}\cdot\underline{B}(\underline{k}) = 0 \Rightarrow \underline{B}_{\parallel}(\underline{k}) = 0$$

mit $\underline{B}(\underline{r}) \sim e^{i\underline{k}\cdot\underline{r}}\underline{B}(\underline{k})$

Magnetfeld ist rein transversal

$$\nabla \cdot \underline{E} = \frac{\rho(\underline{r})}{\varepsilon_0} \Longleftrightarrow \varepsilon_0 \, i\underline{k} \cdot \underline{E}(\underline{k}) = \rho(\underline{k})$$

Fouriertransformation auf beide Seiten

$$\Rightarrow \underline{E}_{\parallel}(\underline{k}) = -\frac{i\underline{k}}{\varepsilon_0 k^2} \rho(\underline{k})$$

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

Das longitudinale elektrische Feld ist also durch die (instantane) Ladungsdichte bestimmt

Man erkennt: Die longitudinalen Anteile von $\underline{E}, \underline{B}$ sind keine "freien" dynamischen Variablen

Zusammenhang zu den Potentialen:

Betrachte konkret Coulomb-Eichung

$$\nabla \cdot \underline{A} = 0 \Longrightarrow \underline{k} \cdot \underline{A}(\underline{k}) = 0 \Leftrightarrow \underline{A}_{\parallel}(\underline{k}) = 0$$

Auch $\underline{A}$ ist rein transversal!

(Coulombeichung ist "transversale Eichung") $\underline{A} = \underline{A}_{\perp}$

Folgerung für $\underline{E}$

$$\underline{E} = -\nabla\phi - \dot{\underline{A}} = \underline{E}_{\parallel} + \underline{E}_{\perp}$$

$\underline{A}$ ist transversal $\Rightarrow \underline{E}_{\perp} = -\dot{\underline{A}}_{\perp} = -\dot{\underline{A}}$

entsprechend $\underline{E}_{\parallel} = -\nabla\phi$

und $\phi(\underline{r},t) = \frac{1}{4\pi\varepsilon_0} \int d\underline{r}' \frac{\rho(\underline{r}',t)}{|\underline{r}-\underline{r}'|}$

entspricht Poisson-Gl.

in Coulombeichung!

Zurück zur Lagrangedichte: Betrachte Feld- und Kopplungsbeitrag

$$L_{Feld} + L_{Kopplung} = \int d\underline{r} \; \frac{\varepsilon_0}{2}(\nabla\phi + \dot{\underline{A}})^2 - \frac{1}{2\mu}(\nabla\times\underline{A})^2 - \rho\phi + \underline{j}\cdot\underline{A}$$

betrachte speziell die Terme

$$\underline{A} = \underline{A}_\perp$$

$$I = \int d\underline{r} \left(\frac{\varepsilon_0}{2}(\nabla\phi + \dot{\underline{A}})^2 - \rho\phi \right)$$

$$= \int d\underline{r} \left(\frac{\varepsilon_0}{2}(\underline{E}_\parallel + \underline{E}_\perp)^2 - \rho\phi \right)$$

$$= \int d\underline{r} \left(\frac{\varepsilon_0}{2}(\underline{E}_\parallel^2 + \underline{E}_\perp^2 + 2\underbrace{\underline{E}_\parallel\cdot\underline{E}_\perp}_{\text{Null}}) - \rho\phi \right)$$

$$I = \int d\underline{r} \; \frac{\varepsilon_0}{2}\underbrace{(\dot{\underline{A}}^2)}_{\underline{E}_\perp^2} + \int d\underline{r} \left(\frac{\varepsilon_0}{2}\underline{E}_\parallel^2 - \rho\phi \right)$$

benutze

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

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

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

$$\rho(\underline{r},t) = \sum_{i=1}^{N} q_i \delta(\underline{r}-\underline{r}_i(t))$$
$$\Rightarrow \rho(\underline{k},t) = \int d\underline{r} \; e^{i\underline{k}\cdot\underline{r}}\rho(\underline{r},t) = \sum_{i=1}^{N} q_i e^{i\underline{k}\cdot\underline{r}_i}$$

$$\cong \frac{1}{2\varepsilon_0}\sum_{i=1}^{N}\sum_{j=1}^{N} q_i q_j \int d\underline{k} \; \frac{e^{i\underline{k}\cdot(\underline{r}_i-\underline{r}_j)}}{k^2}$$

$$= \frac{1}{8\pi\varepsilon_0}\sum_{i,j}{}' \frac{q_i q_j}{|\underline{r}_i - \underline{r}_j|}$$

Fouriertransformierte von $\frac{1}{k^2}$ ist $\sim \frac{1}{r}$

(Die diagonalen Terme $i=j$ müssen abgezogen werden! (hier nicht ordentlich begründet)

entspricht der Wechselwirkung eines Systems von Punktladungen!

~~und~~ nun:

ϕ ist Lösung der („elektrostatischen") Poisson-Gl.!

$$\int d\underline{r}\,\rho(\underline{r},t)\,\phi(\underline{r},t) = \frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\int d\underline{r}\,\rho(\underline{r},t)\int d\underline{r}'\,\frac{\rho(\underline{r}',t)}{|\underline{r}-\underline{r}'|}$$

mikroskop. Ausdruck für ρ

$$= \frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\sum_{i=1}^{N}\sum_{j=1}^{N}{}'\,\frac{q_i q_j}{|\underline{r}_i-\underline{r}_j|}$$

$$\Rightarrow I = \int d\underline{r}\,\underbrace{\frac{\varepsilon_0}{2}\dot{\underline{A}}^2}_{E_\perp^2} + \int d\underline{r}\,\frac{\varepsilon_0}{2}E_\parallel^2 - \rho\phi$$

$$= \int d\underline{r}\,\frac{\varepsilon_0}{2}\dot{\underline{A}}^2 - \frac{1}{8\pi\varepsilon_0}\sum_{i,j}{}'\,\frac{q_i q_j}{|\underline{r}_i-\underline{r}_j|}$$

Damit lautet die volle Lagrange-Funktion
(in Coulomb-Eichung!)

$$L_{voll} = \underbrace{\sum_{i=1}^{N}\frac{1}{2}m\dot{\underline{r}}_i^2}_{\text{Teilchen}} + \underbrace{\int d\underline{r}\left(\frac{\varepsilon_0}{2}(\dot{\underline{A}})^2 - \frac{1}{2\mu_0}(\nabla\times\underline{A})^2\right)}_{\text{Feld}} + \underbrace{\int d\underline{r}\,\underline{j}\cdot\underline{A} - W_{Coul}}_{\text{Kopplung}}$$

und $W_{Coulomb} = \frac{1}{8\pi\varepsilon_0} \sum_{i,j}' \frac{q_i q_j}{|\underline{r}_i - \underline{r}_j|}$

Jetzt kommt nur nur $\underline{A}_\perp$ und damit die transversalen Anteile der Felder vor, $\phi(\underline{r},t)$ ist als dyn. Variable eliminiert!

Jetzt: Übergang zur Hamiltonfunktion

Kanonisch konjugierte Impulse:

$$p_i = \frac{\partial L}{\partial \dot{\underline{r}}_i} = \frac{\partial}{\partial \dot{\underline{r}}_i}\left(L^{Teilchen} + L^{Kopplung} \right)$$

$$= m\dot{\underline{r}}_i + q_i \underline{A}(\underline{r}_i,t) \qquad (\underline{A} = \underline{A}_\perp)$$

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

Hamiltonfunktion via Legendretransformation

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

$$= \sum_{i=1}^{N} p_i \frac{1}{m}(p_i - q\underline{A}) + \int d\underline{r}\, \varepsilon_0 (\dot{\underline{A}})^2$$

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

$$- \underbrace{\int d\underline{r}\, \underline{j}\cdot\underline{A}}_{\sum_i q_i \dot{\underline{r}}_i \underline{A}} + W_{Coulomb}$$

$$\dot{\underline{r}}_i = \frac{1}{m}(p_i - q\underline{A})$$

$\Rightarrow$ Ergebnis für die klassische Hamiltonfunktion

$$\boxed{\begin{aligned} H = &\sum_{i=1}^{N} \frac{1}{2m}\left(\underline{p}_i - q_i \underline{A}(\underline{r}_i,t)\right)^2 \\ &+ \int d\underline{r} \left(\underbrace{\frac{\varepsilon_0}{2}\left(\dot{\underline{A}}(\underline{r},t)\right)^2 + \frac{1}{2\mu_0}\left(\nabla \times \underline{A}(\underline{r},t)\right)^2}_{\text{Energiedichte des transversalen Feldes}} \right) \\ &+ W_{\text{Coulomb}} \end{aligned}}$$

Quantisierung:

$$\underline{r}_i \longrightarrow \hat{\underline{r}}_i \qquad \text{mit } \left[\hat{r}_{i,k}, \hat{p}_{j,l}\right] = i\hbar\, \delta_{ij}\, \delta_{kl}$$

$$\underline{p}_i \longrightarrow \hat{\underline{p}}_i$$

$$A_k \longrightarrow \hat{A}_k \quad , \quad \Pi_{A_k} = -\varepsilon_0 E_k \overset{= \varepsilon_0 \dot{A}_k}{} \longrightarrow \hat{\Pi}_k$$

Konsistenz mit Coulombeichung

Kommutator $\left[\hat{A}_k(\underline{r},t), \hat{\Pi}_l(\underline{r}',t)\right] = i\hbar\, \delta^{\perp}_{kl}(\underline{r}-\underline{r}')$

hier ohne Beweis:

s. z.B. Schwabl
Cohen-Tannoudji et al. "Photons and Atoms"

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

Wir entwickeln $\hat{\underline{A}}(\underline{r},t)$ wieder in Moden

(Erinnerung:

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

$$\hat{\underline{E}}_\perp(\underline{r},t) = -\dot{\hat{\underline{A}}}(\underline{r},t) = -\hat{\underline{\Pi}}(\underline{r},t)\cdot\frac{1}{\varepsilon_0}$$

$$= \sum_{\underline{k}} \left(\quad \right)\left(-i\omega_k \hat{a}_{\underline{k}} \underline{u}_{\underline{k}}(\underline{r}) e^{-i\omega_k t} + \ldots \right)$$

Analog zu den Überlegungen beim ungekoppelten Strahlungsfeld kann man dann schreiben:

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

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

beachte auch:

$\hat{a}^+_{\underline{k}}, a_{\underline{k}}$ können direkt durch $\hat{\underline{A}}, \hat{\underline{\Pi}}$ ausgedrückt werden (beachte Orthogonalität der $\underline{u}_{\underline{k}}(\underline{r})$!)

$$\hat{a}^+_{\underline{k}} \sim \int d\underline{r} \; \underline{u}^*_{\underline{k}}(\underline{r}) \left(\varepsilon_0 \omega_{\underline{k}} \hat{A} + i\hat{\Pi}\right)$$

$\hat{a}_{\underline{k}}$ entsprechend

analog zum harmonischen Oszillator:

dort sind $\hat{a}, \hat{a}^+$ Linearkombination aus $\hat{x}$ und $\hat{p}$

Gesamtausdruck für Hamiltonian

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

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

Coulombenergie wird in den Teilchenanteil gezogen!

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

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

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