

Entsprechend Operatoren des Delta-Feldes im Streudiagramm

$$\underline{\hat{E}}(z) = i \sum_K \left(\frac{\hbar \omega_K}{2\epsilon_0} \right)^{\frac{1}{2}} \left(\hat{a}_K u_K(z) - \hat{a}_K^\dagger u_K^*(z) \right)$$

Unitäre Transformation (von $\hat{\Phi}$)

$$\hat{\Phi}_{pA} \rightarrow \hat{T} \hat{\Phi} \hat{T}^\dagger$$

mit

$$\hat{T} = e^{-i \int \hat{d} \cdot \hat{A}}$$

$$\hat{d} = \sum_{i=1}^N q_i \hat{x}_i$$

Operatoren zu \hat{A}
im Streudiagramm
 $\hat{A}(z=0)$!

Operatoren des (Delta-) Dipolmoments

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

der Transformation auf
Auswirkung diese einzelnen Terme in $\hat{\Phi}_{pA}$?

Baker-Hausdorff-Formel

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

$$\text{mit } [\hat{G}, \hat{F}]_n = [\hat{G}, [\hat{G}, \hat{F}]_{n-1}]$$

$$\text{und } [\hat{G}, \hat{F}]_0 = \hat{F}$$

$$\text{hier: } z=1, \hat{G} = -i \int \hat{d} \cdot \hat{A}$$

• Coulombterm
$$W_{\text{Coulomb}} = \frac{1}{8\pi\epsilon_0} \sum_i \sum_{j \neq i} \frac{q_i q_j}{|z_i - z_j|}$$

$$\hat{T} \hat{N}_i \hat{T}^\dagger = \hat{N}_i \quad (\text{Nur die Vorkommt Terme, da } [\hat{N}_i, \hat{d}_j] = 0 \text{ und } \hat{A}(0) \text{ hängt nicht von } \hat{d}_i \text{ ab!})$$

\Rightarrow Coulombterm bleibt unverändert

$$[\hat{A}(0), \hat{N}_i] = 0$$

• Term mit $(\hat{p}_i - q_i \hat{A}(0))^2$ (Kinetische Energie)

$$\hat{T} \hat{A} \hat{T}^\dagger = \hat{A} \quad \leftarrow \text{aus } n=0$$

$$\begin{aligned} \hat{T} \hat{p}_i \hat{T}^\dagger &= e^{-i\frac{d}{\hbar} \hat{A}} \hat{p}_i e^{i\frac{d}{\hbar} \hat{A}} \\ &= \hat{p}_i + [\hat{p}_i, i\frac{d}{\hbar} \hat{A}] = \hat{p}_i + \sum_j [\hat{p}_i, i\frac{d}{\hbar} q_j \hat{A}_j(\mathbf{r})] \\ &\quad \text{(aus } n=0) \quad \text{aus } n=1 \end{aligned}$$

$$q_j \hat{A}_j(\mathbf{r})$$

$$= \hat{p}_i + \hat{q}_i \hat{A}(\mathbf{r})$$

Die unitäre Transformation erzeugt also eine Veränderung des Impulses!

$$\begin{aligned} \Rightarrow \hat{T} (\hat{p}_i - q_i \hat{A})^2 \hat{T}^\dagger &= \hat{T} \hat{p}_i^2 \hat{T}^\dagger - 2q_i \hat{T} \hat{p}_i \hat{A} \hat{T}^\dagger + \hat{T} q_i^2 \hat{A}^2 \hat{T}^\dagger \\ &= \hat{T} \underbrace{\hat{p}_i \hat{T}^\dagger \hat{T}}_{\hat{p}_i} \hat{p}_i \hat{T}^\dagger - 2q_i \underbrace{\hat{T} \hat{p}_i \hat{T}^\dagger}_{\hat{p}_i + \hat{q}_i \hat{A}} \hat{T}^\dagger \hat{A} + q_i^2 \hat{T} \hat{A} \hat{T}^\dagger \hat{T}^\dagger \hat{A} \hat{T}^\dagger \\ &= (\hat{p}_i + q_i \hat{A})^2 - 2q_i (\hat{p}_i + q_i \hat{A}) \cdot \hat{A} + q_i^2 \hat{A}^2 \\ &= \hat{p}_i^2 \quad !!! \end{aligned}$$

Transformation vereinfacht den kinetischen Beitrag

• Strahlungssystem

$$H_{\text{feld}} = \sum_{\mathbf{k}} \hbar \omega_{\mathbf{k}} (\hat{a}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{k}} + \frac{1}{2})$$

Wirkung der unitären Transformation: $\hat{T} = e^{-i\frac{d}{\hbar} \hat{A}}$

$$\hat{A} = \hat{A}(0) = \sum_{\underline{k}} \left(\frac{\hbar}{2m_{\underline{k}} \epsilon_0} \right)^{\frac{1}{2}} \left(u_{\underline{k}}(0) \hat{a}_{\underline{k}} + u_{\underline{k}}^*(0) \hat{a}_{\underline{k}}^\dagger \right)$$

wird wieder von $\hat{a}_{\underline{k}}$, $\hat{a}_{\underline{k}}^\dagger$ ab!

man findet:

$$\begin{aligned} \hat{T} \hat{a}_{\underline{k}}^\dagger \hat{a}_{\underline{k}} \hat{T}^\dagger &= \hat{T} \hat{a}_{\underline{k}}^\dagger \hat{T}^\dagger \hat{T} \hat{a}_{\underline{k}} \hat{T}^\dagger \\ &= \hat{a}_{\underline{k}}^\dagger \hat{a}_{\underline{k}} + \hat{\lambda}_{\underline{k}} \hat{a}_{\underline{k}}^\dagger \\ &\quad + \hat{\lambda}_{\underline{k}}^\dagger \hat{a}_{\underline{k}} + \hat{\lambda}_{\underline{k}} \hat{\lambda}_{\underline{k}} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \hat{T} \hat{a}_{\underline{k}}^\dagger \hat{T}^\dagger &= \hat{a}_{\underline{k}}^\dagger + \hat{\lambda}_{\underline{k}} \\ \hat{T} \hat{a}_{\underline{k}} \hat{T}^\dagger &= \hat{a}_{\underline{k}} + \hat{\lambda}_{\underline{k}}^\dagger \end{aligned} \quad (\text{dude!})$$

mit $\hat{\lambda}_{\underline{k}} = i \left(\frac{1}{2\hbar m_{\underline{k}} \epsilon_0} \right)^{\frac{1}{2}} \hat{d} \cdot u_{\underline{k}}^*(0)$

aus dem ursprüngl. Strahlungssystem
entstehen also insgesamt 4 Beiträge

- davon einer $\sim \hat{a}_{\underline{k}}^\dagger \hat{a}_{\underline{k}}$
- zwei $\sim \hat{a}_{\underline{k}}^\dagger \hat{d} \cdot u_{\underline{k}}(0)$ (beide adjungiert) : linear im Dipolmoment
- einer $\sim (\hat{d} \cdot u_{\underline{k}}(0))^2$ quadratisch im Dipolmoment

Der neue Hamiltonian $\hat{T} \hat{H}_{\text{ph}} \hat{T}^\dagger$ hat damit folgende Form:

$$\hat{H}_{\text{dE}} = \underbrace{\sum_{i=1}^N \frac{p_i^2}{2m}}_{\hat{T}(\hat{H}_{\text{Teilchen}} + W_{\text{Coulomb}}) \hat{T}^\dagger} + \underbrace{\hat{H}_{\text{feld}} + \hat{H}_{\text{dipol}} + \sum_{\underline{k}} \frac{|\hat{d} \cdot u_{\underline{k}}(0)|^2}{2\epsilon_0}}_{\hat{T} \hat{H}_{\text{feld}} \hat{T}^\dagger} \quad (**)$$

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

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

$$= -\hat{d} \cdot \hat{E}(0) \quad !!!$$

\hat{H}_{dE} hat eine physikalische plausible Struktur

- erster und zweiter Term: neue kinetische Energie + Coulombwechselwirkung der geladenen Teilchen

- dritter Term: reines (transversales) Strahlungsfeld
- \hat{H}_{Dipol} : repräsentiert die Kopplung zw. den Teilchen und dem quantisierten elektr. Feld

Kopplung ist formal völlig analog zu Energie einer klassischen permanenten Dipolmoments \underline{d} in einem elektr. Feld \underline{E}

$$U_{\text{klass}} = -\underline{d} \cdot \underline{E}$$

- Letzter Term in $(*)$: Quadratisch in $\hat{\underline{d}}$
"Dipolare Selbstenergie"

Nachbemerkung:

Grundlage der Konstruktion des Dipol-Hamiltonians $(*)$ \hat{H}_{dE}
war die Approximation: $\hat{\underline{A}}(\underline{r}) \approx \hat{\underline{A}}(0)$ (plus die unitäre Transformation)

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

IV. 4.2. Matrixelemente in Dipolnäherung

Auf Basis von \hat{H}_{dE} können wir nun den Einfluss von Strahlung auf gebundene Zustände
im Sinne einer Störtheorie behandeln

Konkret: Wir berechnen Matrixelemente der Kopplung in den Eigenzuständen
des reinen Teilchensystems
($\sum_{l=1}^N \hat{\underline{p}}_l + U(\text{partikeln})$)

Kurze Erinnerung: Matrixelemente hängen schon in Einpartikelsystemen sowohl in der Zeitunabhängigkeit als auch in der Zeitabhängigen Störungstheorie auf

z.B. Energie-Komplett 1. Ordng (Zeitunabhängig) $\Delta E^{(0)} = \langle m | V | n \rangle$ \hat{V} Stör-Hamiltonian $|m\rangle, |n\rangle$ Eigenzustände

Zeitabhängig: Fermi's Golden Rule, monochromatischer Strahlung $\Gamma_{n \rightarrow m} \sim |\langle m | V | n \rangle|^2 \delta(E_m - E_n \pm \hbar\omega)$

Betrachte zunächst den "semi-klassischen" Fall:

\underline{E} -Feld ist nicht quantisiert (voll quantenmechan. Behandlung kommt später!)

d.h. in Ausdruck für \underline{E} ersetzen wir: $\hat{a}_{\underline{k}} \rightarrow a_{\underline{k}}$

Im Ausdruck für das Dipolmoment, $\hat{a}_{\underline{k}}^{\dagger} \rightarrow a_{\underline{k}}^{*}$ $\swarrow \searrow$ Zahlen
 $\underline{d} = \sum_{i=1}^N q_i \underline{r}_i$ Wert gegeben!

Vernachlässige außerdem den Kommutator (Dipolnäherung) $\sim |\underline{d} \cdot \underline{u}_{\underline{k}}(0)|^2$

\Rightarrow die interessierenden Matrixelemente haben die Struktur:

$\langle m | \underline{d} \cdot \underline{u}_{\underline{k}}(0) | n \rangle$ mit $\underline{d} = \sum_{i=1}^N q_i \underline{r}_i$

Erinnerung $A_{Dipol} = -\underline{d} \cdot \left(i \frac{e^{-i\omega t}}{\hbar} \frac{1}{2\epsilon_0} \underline{u}_{\underline{k}}(0) a_{\underline{k}} - c.c. \right)$

und $|m\rangle, |n\rangle$

Eigenzustand des "ungestörten" Hamiltonians $\sum_{i=1}^N \frac{\hat{p}_i^2}{2m} + W_{\text{außen}}$ (Vielteilchenzustand)

Betrachte z.B. Wasserstoffatom (exakt lösbar)

$|m\rangle \rightarrow |l, m, n\rangle$ (Vernachlässige Spin)

es gilt (hier ohne Beweis)

$$\langle n_1, l_1, m_1 | \hat{r} | n_2, l_2, m_2 \rangle = - (-1)^{l_1 + l_2} \langle n_1, l_1, m_1 | \hat{r} | n_2, l_2, m_2 \rangle$$

zeigt man
über die
Eigenschaften
der
Wigner-Dicke

Das ist eine Folge der Tatsache, dass \hat{r} unter Raumspiegelung
ungerade ist ("ungerade Parität")

Klassischer: Matrixelemente $\langle n_1, l_1, m_1 | \hat{r} | n_2, l_2, m_2 \rangle$ sind nur dann von Null
verschieden, falls

$$l_2 = l_1 \pm 1$$

$$(-1)^{l_1 + l_2} = (-1)^{2l_1 \pm 1} = -1$$

"Dipol-Auswahlregeln I"

Je nach Richtung der "Mode" $\underline{u}_\mu(0)$ kommt es zu weiteren Einschränkungen

z.B. $\underline{u}_\mu(0) = \hat{e}_z$ Einheitsvektor in z-Richtung

$$\langle n_1, l_1, m_1 | \hat{e}_z | n_2, l_2, m_2 \rangle \neq 0 \quad \text{falls } m_1 = m_2 \quad (\text{und } l_2 = l_1 \pm 1)$$

etc.

"Dipol-Auswahlregeln II"

Die Betrachtung dieser Matrixelemente ist wichtig für die Behandlung des Streu-Effekts
sowie induzierter Emission und Absorption (s. Kap III)