


## 2.4. Zerlegung nach linearer, zirkularer Polarisation

Ankoppelung an Licht über Rabi-Frequenz:  $\Omega_{ij} = \frac{\vec{d}_{ij} \cdot \vec{E}}{\hbar}$  : 

Dipolmoment  $\vec{d}_{ij} = \int_S d\vec{r} \varphi_i^*(\vec{r}, t) q \vec{r} \varphi_j(\vec{r}, t)$

$$\vec{\varphi}_i = \{n_i, l_i, m_i, m_{s_i}\} = N_i \underbrace{R_{n_i, l_i}(r)}_{\text{Normierung Radial-anteil}} \underbrace{P_{l_i}^{m_i}(\cos\vartheta)}_{\text{Legendrepolynome}} e^{i m_i \varphi} \underbrace{\chi_{m_{s_i}}}_{\text{Spinor}} \equiv \varphi_{n_i, l_i, m_i, m_{s_i}} \chi_{m_{s_i}}$$

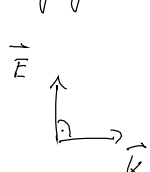
Kugelharmonische

Spinor  $\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$

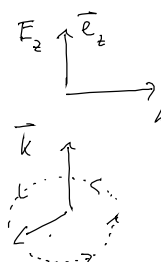
$$\vec{d}_{12} = q \int d\vec{r} \varphi_{n_1, l_1, m_1}^*(\vec{r}) \vec{r} \varphi_{n_2, l_2, m_2}(\vec{r}) \underbrace{\chi_{m_{s_1}} \cdot \chi_{m_{s_2}}}_{\delta_{m_{s_1}, m_{s_2}}}$$

0.te Auswahlregel: Spin bleibt bei optischer Übergang erhalten 

Zerlegung der Vektoren nach linear / zirkular



2 Fälle unterscheiden:



„lineare Polarisation“  
 $\vec{E} = \vec{e}_z \cdot E_0$

„zirkulare Polarisation“  
 $\vec{E} = E_+ \vec{e}_+$   
 (links / rechts - zirkular)

zirkulare Basis  $\vec{e}_+ = \left( \vec{e}_x + i \vec{e}_y \right) \frac{1}{\sqrt{2}}$   $\vec{e}_+^* \cdot \vec{e}_+ = 1$

$$\vec{r} = z \vec{e}_z + a_+ \vec{e}_+ + a_- \vec{e}_-$$

$$a_{\pm} = \frac{1}{\sqrt{2}} (x \pm iy)$$

Skalarprodukt von  $\vec{d}_{ii} \cdot \vec{E}$  in dieser Basis beschreiben

$$\vec{d}_{ii} \cdot \vec{E} = q \int d^3r \underbrace{\varphi_1^* z \varphi_1}_{\text{linear polarisierte Licht}} E_z + \sum_{\pm} q \int d^3r \underbrace{\varphi_1^* (x \pm iy) \varphi_1}_{\text{zirkular polarisierte Licht}} E_{\pm}$$

Absorption von linear polarisierte Licht, von zirkular polarisierte Licht

### 2.5. Dipol aus Wahlregel f. H-ähnliche Atome

$$d_z \left. \begin{array}{l} z = r \cos \vartheta \\ x \pm iy = r \sin \vartheta e^{\pm i\varphi} \end{array} \right\} = \int_0^{\infty} d r r^2 R_{n_1 l_1}^*(r) r R_{n_2 l_2}(r) \quad (1)$$

$$\cdot \int_0^{2\pi} d\varphi e^{-i m_1 \varphi} \left\{ \begin{array}{l} 1 \\ e^{\pm i\varphi} \end{array} \right\} e^{i m_2 \varphi} \quad (2)$$

$$\cdot \int_0^{\pi} d\vartheta \sin \vartheta P_{l_1}^{m_1}(\cos \vartheta) \left\{ \begin{array}{l} \cos \vartheta \\ \sin \vartheta \end{array} \right\} P_{l_2}^{m_2}(\cos \vartheta) \quad (3)$$

alle 3 Faktoren müssen  $\neq 0$  sein damit WW nicht Null ist

(0) Spin  $d_z$  bleibt erhalten:  $m_{l_1} = m_{l_2}$

(1) 1. Auswahlregel: keine Einschränkung bei optischen Übergang bzgl.  $l$

(2)  $d_z \sim \int_0^{2\pi} d\varphi e^{-i m_1 \varphi} e^{i m_2 \varphi} = \frac{e^{-i(m_1 - m_2)\varphi}}{-i(m_1 - m_2)} \Big|_0^{2\pi} = \begin{cases} m_1 = m_2 & \text{falls } d_z \neq 0 \\ m_1 \neq m_2 & \text{falls } d_z = 0 \end{cases}$

$\Rightarrow d_z \sim \delta_{m_1, m_2}$

$$d_{\pm} \sim \int_0^{2\pi} d\varphi e^{-im_1\varphi} e^{\pm i\varphi} e^{im_2\varphi} = \delta_{m_1 \pm 1, m_2}$$

2. Auswahlregel: f. optisch Übergänge muß  $\Delta m = 0, \pm 1$  sein  
 $\Delta m = m_1 - m_2$

dabei gilt  $\Delta m = 0$  f. linear polarisierte Licht

$\Delta m = \pm 1$  f. zirkular polarisierte Licht

③

$$d_z \sim \left| \langle x = \cos\vartheta \rangle \right| \sim \int_{-1}^1 dx \underbrace{P_{l_1}^{m_1}(x)} \times P_{l_2}^{m_2}(x) \text{ mit } m_1 = m_2$$

x stört zum Ausnutzen der Orthogonalitätsbeziehungen,

verwende daher:  $(2l+1) x P_l^m(x) = \underbrace{(l-m+1) P_{l+1}^m(x)} + \underbrace{(l+m) P_{l-1}^m(x)}$

mit  $\Delta m = 0$  und da dann erhaltene Orthogonalität folgt  $\Delta l = l_2 - l_1 = \pm 1$

3. Auswahlregel: Bei optisch Übergänge muß  $\Delta l = \pm 1$  sein,  
dies gilt f. linear und zirkular Polarisation

Zusammenfassung: Kein Auswahlregel f.  $l$

Drehimpuls  $Q \pm \Delta l$  Änd. um  $\Delta l = \pm 1$

Magnet  $Q \pm \Delta m$   $\Delta m = 0$  (linear),  $\Delta m = \pm 1$  (zirkular)

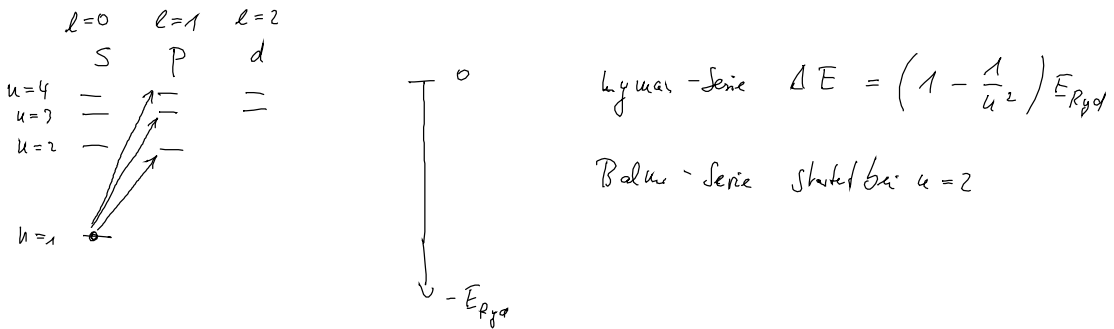
Spin  $Q \pm \Delta m_s = 0$

kann an Erhaltungssätzen bei Licht-Materie WW (z.B. Drehimpuls)

### 3. Beispiele

#### 3.1. Freie H-Atome

welche optische Übergänge sind beobachtbar und mit den energetisch Abständen in Übereinstimmung zu bringen?



Bemerkung  $\forall$  optisch Übergänge: Auswahlregel beziehe sich auf Dipol auswertungen ( $\vec{r}$ )

f. die nächst Ordnung (Quadrupole ( $\vec{r}^2$ )) gilt

$\Delta l = 0, \pm 2$ , aber  $10^5$  schwächer als Dipole

$\vec{d} = 0 \hat{=} \text{„dipol verboten“}$

Frage: können die aus  $QZ (l, m_l, m_s)$  aus spektroskopisch detektiert werden?

z.zt nur Hauptquantenzahl  $n$

Ja, denn aufgrund einer weiten Streuung wird die Wellenfunktion „verwirrt“ und damit bei verschiedenen Energien „lokalisiert“.

#### 3.2. H-Atome im Magnetfeld: Zeeman effekt

Aufgabe im Magnetfeld + Auswirkung auf opt. Spektrum

$$\underline{H} = \underline{H}_{\text{Atom}} - \vec{\mu} \cdot \vec{B}, \quad \vec{B} \text{ extern, statisches Magnetfeld}$$

$\underline{H}_{S-B}$  sei klein gegen Magnetfeld,  $\underline{H}_{S-B} \rightarrow 0$ , vernachlässigen

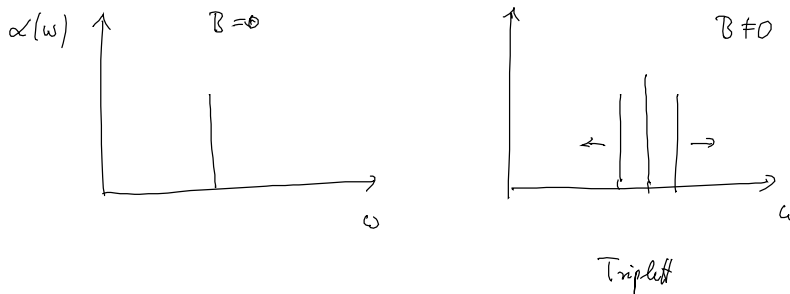
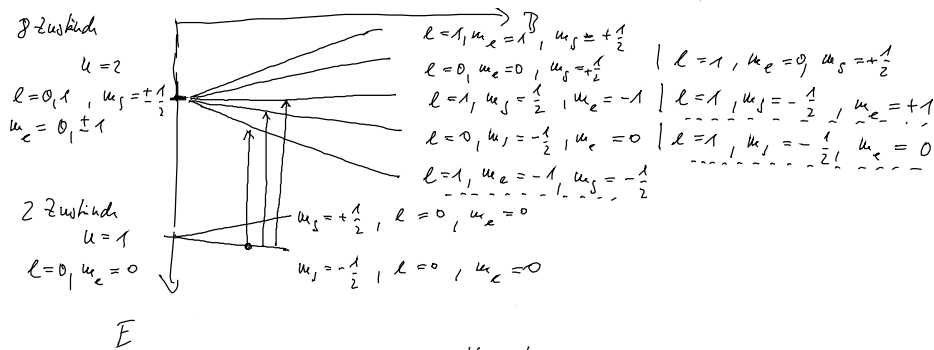
Lösung d. Pauli-Gleichg. bekannt:

Lsg:  $\psi_{uem}^{\pm}$  als Wasserstoffwellenfunktion, unverändert

$$E_{n, m_l, m_s}^{\pm} = \left( E_n + \mu_B \hbar \left( m_l \pm \frac{g}{2} m_s \right) \right), \quad g \approx 2$$

$E_n$ : Wasserstoffenergie

$\mu_B$ : Bohr'scher Magneton (Zahl),  $\mu_B \approx \frac{e \hbar}{2 m_e}$



Magnetfeld spaltet Linie auf und es entsteht in H-Atom Triplett

Triplettaufspaltung: normaler Zeeman-Effekt (H-Atom)

Abw. d. g.: anomaler Zeeman-Effekt (Na-Atom: 4 Linien: Spin-Bahn,  $E_{ue}, \vec{J}$ )  
 viel verbreiteter, daher  
 der: normal

### 3.3. Starkfeld: statische elektrische Felder $E$

H-Atom:  $J$  linear ( $\sim E$ ) Energieverschiebung

andere Atome:  $\sim E^2$

Eigenfunktion im elektr. Feld nicht bekannt:

$$H\psi = \varepsilon\psi \quad \psi = \sum_u c_u \varphi_u \quad \varphi_u: \text{H-Atom Fkt. ohne E-Feld}$$

$$\varepsilon c_u = \varepsilon_u c_u - \sum_v \vec{d}_{uv} \cdot \vec{E} c_v$$

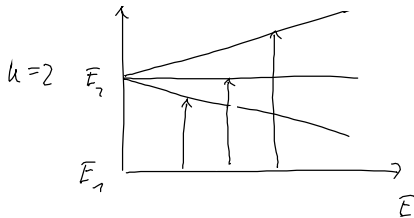
führt auf Matrixgleichung f.  $c_u$ 's

ein fadest. Bsp:  $u=2$  mit  $J$  Zuständen  $2s, 2p_x, 2p_y, 2p_z$  ( $\cdot 2$  Spin)

$$d_{sp} \neq 0 \neq \underline{d_{sp_z}} \quad \text{f. } \Delta l = \pm 1, \Delta m = 0$$

*linear polarisiert*

$$\varepsilon \rightarrow \varepsilon_{\pm} = E_2 \pm |\vec{d}_{sp_{\pm}} \cdot \vec{E}|$$



Aufspaltung d.  $E_2$ -Niveaus in 3 Niveaus f.  $u=2$ .