Wechselwirkungen mit dem Strahlungsfeld

3.6. Wechselwirkung mit dem Strahlungsfeld

Ziel: Beschreibung der Emission und Absorption von Photonen

Hamiltonoperator eines Elektrons im elektromagnetischen Feld: (Spin vernachlässigt)

$$H = \frac{1}{2m}\left(\vec{p} - \frac{e}{c}\vec{A}(\vec{r},t)\right)^2 + e\phi(\vec{r},t) + V(\vec{r})$$

$$=: H_0 + V(t)$$

Für Atome mit mehreren Elektronen:

$$H_0 = \sum_i \left(\frac{1}{2m}\vec{p}_i^{\,2} + V(\vec{r}_i)\right)$$

$$V(t) = \sum_i \left(-\frac{e}{2mc}\{\vec{p}_i, \vec{A}(\vec{r}_i,t)\} + \frac{e^2}{2mc^2}\vec{A}^2(\vec{r}_i,t) + e\phi(\vec{r}_i,t)\right)$$

Wir definieren die Teilchendichte

$$\rho(\vec{r}) = \sum_i \delta(\vec{r} - \vec{r}_i)$$

(Elektronen am Ort $\vec{r}_i$)

und die Teilchenstromdichte

$$\vec{j}(\vec{r}) = \frac{1}{2} \sum_i \left\{ \frac{\vec{p}_i}{m}, \delta(\vec{r} - \vec{r}_i) \right\}$$

Damit kann $V(t)$ geschrieben werden als

$$V(t) = \int d^3r \left\{ -\frac{e}{c} \vec{j}(\vec{r}) \cdot \vec{A}(\vec{r}, t) + \frac{e^2}{2mc^2} \rho(\vec{r}) \vec{A}^2(\vec{r}, t) + e\rho(\vec{r}) \phi(\vec{r}, t) \right\}$$

Um die Emission / Absorption eines Photons beschreiben zu können, quantisieren wir das Strahlungsfeld.

Quantisierung des Strahlungsfeldes

Photonen können als Oszillations-Modi des elektromagnetischen Feldes verstanden werden.

$\vec{A}(\vec{r}, t)$ kann als Fourier-Zerlegung in Eigenfrequenzen geschrieben werden.

Erinnerung an harmonischen Oszillator:

$$\boxed{H_{\text{classic}} = \frac{m}{2}\dot{q}^2 + \frac{m\omega^2}{2} q^2}$$

mit $q = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \left(a e^{-i\omega t} + a^+ e^{i\omega t} \right)$,

$[a, a^+] = 1$ hat H die einfache Form

$$H = \hbar\omega \left(a^+ a + \frac{1}{2} \right)$$

Ähnlich verfahren wir mit dem freien Strahlungsfeld.

Wir verwenden Coulomb-Eichung $\vec{\nabla}\cdot\vec{A}=0$

NB: Es gilt $[p_j, F(\vec{x})] = -i\hbar \frac{\partial F(\vec{x})}{\partial x_j}$

für jede Funktion $F(\vec{x})$, die eine Reihenentwicklung in $\vec{x}$ hat. Deshalb gilt in Coulomb-Eichung $[\vec{p}, \vec{A}] = 0$.

Außerdem sei $\phi(\vec{r},t) = 0$ (Abwesenheit von Quellen)

Dann gilt $\vec{E} = -\frac{1}{c}\frac{\partial \vec{A}}{\partial t}$

$$\vec{B} = \vec{\nabla}\times\vec{A}$$

$\vec{A}$ erfüllt die freie Wellengleichung

$$\left(\frac{1}{c^2}\frac{\partial^2}{\partial t^2} - \frac{\partial^2}{\partial \vec{x}^2}\right)\vec{A}(\vec{x},t) = 0$$

$\Rightarrow$ kann als Fourier-Reihe geschrieben werden: $\vec{A}(\vec{r},t) = \sum_k \vec{A}_k(t)\, e^{i\vec{k}\vec{r}}$

Die Amplituden $\vec{A}_k(t)$ können analog zum harmonischen Oszillator durch Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren ausgedrückt werden.

Für die Normierung betrachten wir den Hamiltonoperator des freien Strahlungsfeldes:

$$H_{Str} = \frac{1}{8\pi}\int d^3r\, (\vec{E}^2 + \vec{B}^2)$$

$$= \frac{V}{8\pi}\sum_k \left(\frac{1}{c^2} |\dot{\vec{A}}_k|^2 + |\vec{k} \times \vec{A}_k|^2 \right)$$

wobei verwendet wurde

$$\int d^3r\, e^{i(\vec{k}-\vec{k}')\vec{r}} = V \cdot \delta_{\vec{k}\vec{k}'}$$

V ist das Volumen einer box, das Feld sei in dieser box mit periodischen

Randbedingungen:

$$\vec{k} = \frac{2\pi}{L}(n_x, n_y, n_z) \; ; \; n_x, n_y, n_z \in \mathbb{N},$$

$$L^3 = V$$

(in der Quantenfeldtheorie wird die Summe über $\vec{k}$ durch ein Integral ersetzt)

Vergleich von $H_{St.}$ mit $H_{classic}$ führt auf

$$\omega \hat{=} c \cdot |\vec{k}| =: \omega_k \quad ; \quad m \hat{=} \frac{1}{4\pi c}$$

Außerdem führen wir Polarisationsvektoren

$\vec{\varepsilon}_\lambda(\vec{k})$ ein mit $\lambda \in \{1, 2\}$

$$|\vec{\varepsilon}_\lambda(\vec{k})| = 1, \quad \varepsilon^*_{\lambda'}(\vec{k})\, \varepsilon_\lambda(\vec{k}) = \delta_{\lambda\lambda'}$$

$$\vec{\varepsilon}_1 \times \vec{\varepsilon}_2 = \frac{\vec{k}}{|k|}$$

Für $\vec{k} = |\vec{k}|\vec{e}_z$ können wir wählen

$\vec{\varepsilon}_1(\vec{k}) = \vec{e}_x$, $\vec{\varepsilon}_2(\vec{k}) = \vec{e}_y$ („lineare Polarisation")

oder:

$$\vec{\varepsilon}_{\lambda=+}(\vec{k}) = -\frac{1}{\sqrt{2}}(\vec{e}_x + i\vec{e}_y)$$

$$\vec{\varepsilon}_{\lambda=-}(\vec{k}) = \frac{1}{\sqrt{2}}(\vec{e}_x - i\vec{e}_y)$$

(„zirkulare Polarisation")

Damit ist eine Darstellung von $\vec{A}(\vec{r},t)$, die alle Bedingungen an $\vec{A}$ erfüllt, gegeben durch

$$A(\vec{r},t) = \sum_{\vec{k},\lambda} \sqrt{\frac{2\pi\hbar c}{|\vec{k}|\cdot V}} \left(a_{\vec{k},\lambda}\, \vec{\varepsilon}_\lambda(\vec{k})\, e^{i(\vec{k}\vec{r}-\omega_k\cdot t)} + a^\dagger_{\vec{k},\lambda}\, \vec{\varepsilon}^{\,*}_\lambda(\vec{k})\, e^{-i(\vec{k}\vec{r}-\omega_k\cdot t)} \right)$$

$a^\dagger_{\vec{k},\lambda}$ und $a_{\vec{k},\lambda}$ sind die Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren eines Photons mit

Wellenzahl $\vec{k}$ und Polarisation λ.

In Analogie zum harmonischen Oszillator muß gelten

$$[a_{\vec{k},\lambda}, a^+_{\vec{k}',\lambda'}] = \delta_{\vec{k}\vec{k}'}\,\delta_{\lambda\lambda'}$$

$$[a_{\vec{k},\lambda}, a_{\vec{k}',\lambda'}] = 0$$

$$[a^+_{\vec{k},\lambda}, a^+_{\vec{k}',\lambda'}] = 0$$

Einsetzen in H_{str} liefert

$$\boxed{H_{str} = \sum_{\vec{k},\lambda} \hbar\,\omega_k \Big(\underbrace{a^+_{\vec{k},\lambda}\, a_{\vec{k},\lambda}}_{\hat{n}_{\vec{k},\lambda}} + \frac{1}{2}\Big)}$$

Die Operatoren $\hat{n}_{\vec{k},\lambda} = a^+_{\vec{k},\lambda}\, a_{\vec{k},\lambda}$

haben die Eigenwerte $n_{\vec{k},\lambda} = 0, 1, 2, \ldots$

und Eigenzustände $|n_{k,\lambda}>$

mit $|n_{k,\lambda}> = \frac{1}{\sqrt{n_{k,\lambda}!}} \left(a^+_{\vec{k},\lambda}\right)^{n_{\vec{k},\lambda}} |0>$

z.B. Photon mit Impuls $\hbar\vec{k}$ und Polarisation λ :

$$|\vec{k},\lambda> = a^+_{\vec{k},\lambda}|0>$$

Zustand mit 2 Photonen :

$$|\vec{k},\lambda; \vec{k}'\lambda'> = a^+_{\vec{k},\lambda} a^+_{\vec{k}',\lambda'} |0>$$

$$H_{St} = \sum_{\vec{k},\lambda} \hbar\omega_k \left(\hat{n}_{\vec{k},\lambda} + \frac{1}{2}\right)$$

Die Eigenzustände von H_{St} sind direkte

Produkte $|\ldots, n_{\vec{k},\lambda}, \ldots> = \prod_{\vec{k}_i,\lambda_i} |n_{k_i,\lambda_i}>$

$a_{\vec{k},\lambda}$ erniedrigt die Besetzungszahl der Schwingung mit $\vec{k},\lambda$ um eins, die anderen Besetzungszahlen bleiben unverändert:

$$a_{\vec{k},\lambda} | \ldots, n_{\vec{k},\lambda}, \ldots > = \sqrt{n_{\vec{k},\lambda}} \, | \ldots, n_{\vec{k},\lambda} - 1, \ldots >$$

$\rightarrow$ $a_{\vec{k},\lambda}$ Vernichtungsoperator

$$a^{+}_{\vec{k},\lambda} | \ldots, n_{\vec{k},\lambda}, \ldots > = \sqrt{n_{\vec{k},\lambda} + 1} \, | \ldots, n_{\vec{k},\lambda} + 1, \ldots >$$

$\rightarrow$ $a^{+}_{\vec{k},\lambda}$ Erzeugungsoperator eines Photons mit Impuls $\hbar \vec{k}$ und Polarisation λ

Der gesamte Hamiltonoperator für die Beschreibung der Wechselwirkung des Atoms mit dem Strahlungsfeld ist also

$$H = H_0 + H_{Str} + V(t) \qquad H_0 = \sum_i \left(\frac{1}{2m} \vec{p}_i^{\,2} + V(\vec{r}_i) \right)$$