2. Störungstheorie

2.1 Stationäre Rayleigh-Schrödinger-Störungstheorie

Hamilton-Operator: $([\hat{H}_0, V] \neq 0)$

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{\mathcal{V}} \equiv \hat{H}_0 + \lambda \hat{V} \quad \text{mit } 0 < \lambda \leq 1$$

wobei alle Eigenzustände von $\hat{H}_0$ exakt bekannt sind:

$$\hat{H}_0 |n^0\rangle = E_n^0 |n^0\rangle$$

und der "Störterm" $\mathcal{V} \equiv \lambda V$ sei ein kleiner $(\lambda \ll 1)$ Zusatzterm im Vergleich zu $\hat{H}_0$

Gesucht sind die diskreten stationären Zustände $|n\rangle$ und Eigenwerte E_n von $\hat{H}$:

$$\hat{H} |n\rangle = E_n |n\rangle$$

Wir nehmen an,

!

$$|n\rangle = |n^{(0)}\rangle + \lambda |n^{(1)}\rangle + \lambda^2 |n^{(2)}\rangle + \dots$$

$$E_n = E_n^{(0)} + \lambda E_n^{(1)} + \lambda^2 E_n^{(2)} + \dots$$

Bemerkungen:

- Häufig ist diese Reihe Nicht Konvergent.
- Wenn $|n^0\rangle$ sich nicht qualitativ von $|n\rangle$ unterscheidet, dann funktioniert Störungstheorie

2.1.1 Nicht entartete Störungstheorie

$$(\hat{H}_0+\lambda\hat{V})(|n^0\rangle+\lambda|n^1\rangle+\lambda^2|n^2\rangle+\cdots)=$$

$$=\underbrace{(E_n^0+\lambda E_n^1+\lambda^2E_n^2+\cdots)}_{=E_n}\underbrace{(|n^0\rangle+\lambda|n^1\rangle+\lambda^2|n^2\rangle+\cdots)}_{=|n\rangle}$$

Koeffizientenvergleich:

λ^0: $$\hat{H}_0|n^0\rangle=E_n^0|n^0\rangle$$

λ^1: $\langle n^0|*|$, $\langle m^0|*|$ $$\hat{H}_0|n^1\rangle+\hat{V}|n^0\rangle=E_n^0|n^1\rangle+E_n^1|n^0\rangle$$

λ^2: $\langle n^0|*|$ $$\hat{H}_0|n^2\rangle+\hat{V}|n^1\rangle=E_n^0|n^2\rangle+E_n^1|n^1\rangle+E_n^2|n^0\rangle$$

λ^K: $$\hat{H}_0|n^K\rangle+\hat{V}|n^{K-1}\rangle=E_n^0|n^K\rangle+\sum_{j=1}^{K}E_n^{(j)}|n^{K-j}\rangle$$

In einem ersten Schritt ignorieren wir die Standardnormierung von $|n\rangle$ und nehmen an:

$$\langle n^0|n\rangle=1$$

wobei auch $\langle n^0|n^0\rangle=1$, dann:

$$1=\langle n^0|n\rangle=\underbrace{\langle n^0|n^0\rangle}_{=1}+\lambda\underbrace{\langle n^0|n^1\rangle}_{=0}+\lambda^2\underbrace{\langle n^0|n^2\rangle}_{=0}+\cdots$$

d.h. $(\forall\lambda)$:

$$\langle n^0|n^1\rangle=\langle n^0|n^2\rangle=\cdots\langle n^0|n^i\rangle=0$$

Multiplizieren mit $\langle n^0|$:

$$\langle n^0|\hat{H}_0|n^1\rangle + \langle n^0|\hat{V}|n^0\rangle = E_n^0\langle n^0|n^1\rangle + E_n^1\langle n^0|n^0\rangle ,$$

$$\langle n^0|n^1\rangle = 0 , \quad \langle n^0|n^0\rangle = 1$$

$E_n^0 \langle n^0|n^1\rangle = 0$

so erhalten wir

$$E_n^1 = \langle n_0|\hat{V}|n_0\rangle \qquad (1)$$

Da $|n^0\rangle$ ein VONS bilden, gilt:

$$|n^1\rangle = \sum_{m(\neq n)}{}' C_m|m^0\rangle \quad \text{mit} \quad C_m = \langle m^0|n^1\rangle$$

$$\left(\sum{}' \equiv \sum_{m(\neq n)}\right)$$

Multiplizieren mit $\langle m^0|$ $\left(\langle m^0| \neq \langle n^0|\right)$

$$C_m\left(E_n^0 - E_m^0\right) = \langle m^0|\hat{V}|n^0\rangle$$

und die erste Korrektur zum Zustand $|n^0\rangle$:

$$(*) \qquad |n^1\rangle = \sum_{m(\neq n)}{}' \frac{\langle m^0|\hat{V}|n^0\rangle}{E_n^0 - E_m^0}|m^0\rangle \qquad (1)$$

2. Ordnung – (multiplizieren (λ^2-Glg.) mit $\langle n^0|$):

$$E_n^{(2)} = \langle n^0|\hat{V}|n^1\rangle = \sum_m{}' \frac{|\langle n^0|\hat{V}|m^0\rangle|^2}{E_n^0 - E_m^0}$$

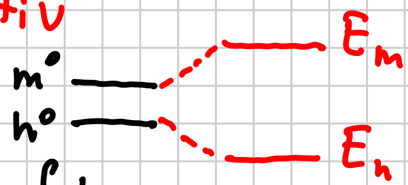
u. s. w.

Bemerkungen.

(1) Gute Störungstheorie $(*)$: $\langle m^0|\hat{V}|n^0\rangle \ll E_n^0 - E_m^0$

(2) Für den Grundzustand ist E_n^2 negativ

(3) $\exists \langle n^0|V|m^0\rangle = \max$: dann



(4) Kontinuierliches Spektrum: $\sum_m \rightarrow \int dm$

2.1.2 Störungstheorie für entartete Zustände

Es seien $|n_a^0\rangle, |n_b^0\rangle, \dots |n_k^0\rangle$ – entartet, d.h.:

$$\hat{H}_0 |n_i^0\rangle = E^0 |n_i^0\rangle \quad , \text{ für } i = a, b, \dots, k$$

Störungsentwicklung: $\langle m^0|V|n^0\rangle / (E_n^0 - E_m^0)$ – ?

Unitäre Transformation:

$$|n_\alpha^0\rangle = \sum_i U_{\alpha i} |n_i^0\rangle$$

1\. Ordnung ($E = E^0 + E^1$, und $|n\rangle = |n^0\rangle$)

$$\begin{cases} (\hat{H}_0 + \hat{V}) |n_\alpha^0\rangle = (E^0 + E^1) |n_\alpha^0\rangle \\ \hat{H}_0 |n_\alpha^0\rangle = E^0 |n_\alpha^0\rangle \end{cases}$$

und

$$\langle n_i^0| * \Big| \quad \hat{V} \sum_j U_{\alpha j} |n_j^0\rangle = E^1 \sum_k U_{\alpha k} |n_k^0\rangle$$

$$\sum_j \left(V_{ij}^1 - E_\alpha^1 \delta_{ij} \right) U_{\alpha j} = 0$$

mit $\quad V_{ij}^1 = \langle n_i^0 | \hat{V} | n_j^0 \rangle$ – hermitesche Matrix

Normierung: $\sum_i |U_{\alpha i}|^2 = 1$

Unitäre Transformation: $(U^+ = U^{-1})$

$$\langle n_\alpha^0 | V | n_\beta^0 \rangle = E_\alpha^1 \delta_{\alpha\beta} \quad \text{– 1. Ordnung}$$

Störungsentwicklung in Basis $|n_\alpha^0\rangle$ und $|m\rangle \neq |n_\alpha\rangle$

$$|n_\alpha^1\rangle = \sum_{m(\neq n_\alpha)}{}' \frac{\langle m^0|\hat{V}|n_\alpha^0\rangle}{E_m^0 - E_\alpha} |m^0\rangle \qquad E_\alpha = E^0 + E_\alpha^1$$

$$E_{n_\alpha}^{(2)} = \sum_m{}' \frac{|\langle m^0|\hat{V}|n_\alpha^0\rangle|^2}{E_m^0 - E_\alpha}$$

n_α) k

m

Es gibt Fälle, in denen $\langle n_i^0|\hat{V}|n_j^0\rangle = 0$ für $\forall i j$

Dann können wir zu höherer Ordnung übergehen:

2. Ordnung:

$$\sum_j \left(V_{ij}^{(2)} - E_\alpha^{(2)} \delta_{ij} \right) U_{\alpha j} = 0$$

mit $$V_{ij}^{(2)} = \sum_{m(\neq\{n_i\})}{}' \frac{V_{im}^1 V_{mi}^1}{E_i^0 - E_m^0}$$

2.2 Brillouin-Wigner-Störungstheorie

- einfacher Zugang zu höherer Ordnung

Exakte Energie: E_n $\left(\underbrace{\hat{H}}_{\hat{H}_0 + \lambda\hat{V}} |n\rangle = E_n |n\rangle \right)$

$\langle n^0|$ $\langle m^0|$ $*\Big|$ $$(E_n - \hat{H}_0)|n\rangle = \lambda\hat{V}|n\rangle$$

mit Normierung! $\langle n^0|n\rangle = 1$

$$E_n = E_n^0 + \lambda\langle n^0|\hat{V}|n\rangle$$

Multiplizieren mit $\langle m^0|$

$$(E_n - E_m^0)\langle m^0|n\rangle = \lambda \langle m^0|\hat{V}|n\rangle$$

Entwicklung von $|n\rangle$ $\{|m^0\rangle$ - VONS$\}$

$$|n\rangle = |n^0\rangle + \sum_{m(\neq n)}{}' \langle m^0|n\rangle\, |m^0\rangle$$

Dann:

$$|n\rangle = |n^0\rangle + \sum_m{}' |m^0\rangle \frac{1}{E_n - E_m^0} \lambda \langle m^0|\hat{V}|n\rangle$$

rechte Seite $\to$ iterativ

$$|n\rangle = |n^0\rangle + \lambda \sum_m{}' |m^0\rangle \frac{1}{E_n - E_m^0} \langle m^0|V|n^0\rangle +$$

$$+\lambda^2 \sum_{k,m}{}' |k^0\rangle \frac{1}{E_n - E_k^0} \langle k^0|\hat{V}|m^0\rangle \frac{1}{E_n - E_m^0} \langle m^0|\hat{V}|n^0\rangle + \ldots$$

– mit exakter Energie E_n !

2.3 Variationsnäherung für den Grundzustand

Spektralform: $(\hat{H}|n\rangle = E_n|n\rangle)$

$$\hat{H} = \sum_n |n\rangle E_n \langle n| \,, \quad \text{mit } E_0 \leq E_1 \leq E_2 \leq \ldots$$

dann gilt für beliebiges $\forall\, \psi$ $(\{n\}$ - VONS$)$

$$\langle\psi|\hat{H}|\psi\rangle = \sum_n \langle\psi|n\rangle E_n \langle n|\psi\rangle \geq E_0 \sum_n \langle\psi|n\rangle\langle n|\psi\rangle = E_0 \langle\psi|\psi\rangle$$

Obere Schranke für E_0:

$$E_0 \leq \frac{\langle\psi|\hat{H}|\psi\rangle}{\langle\psi|\psi\rangle}$$

2.4 Zeitabhängige Störungstheorie

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}(t)$$

def: $|\psi(t)\rangle \equiv |\psi_t\rangle \equiv |n,t\rangle$?

Ungestörtes System:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi_t^0\rangle = \hat{H}_0 |\psi_t^0\rangle$$

$\left(|\psi_{n,t}^0\rangle = e^{-iE_n t/\hbar} |\psi_n^0\rangle \right)$

wobei $\hat{H}_0$ unabhängig von der Zeit ist und stationäre Zustände $|\psi^0\rangle$ mit Energie E_n^0 besitzt.

Zum Zeitpunkt: $t = t_0$ wird das zeitabhängige Störpotential $V(t)$ eingeschaltet:

$$(*) \qquad i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi_t\rangle = \left(\hat{H}_0 + \hat{V}(t) \right) |\psi_t\rangle \qquad (t > t_0)$$

Anfangsbedingung: $|\psi_t\rangle = |\psi_t^0\rangle$ für $t \leq t_0$

Wechselwirkungsdarstellung: ($I \equiv$ WW)

wir führen neue zeitabhängige Zustände $|\tilde{\psi}_t\rangle$ ein:

$$|\psi_t\rangle = e^{-i\hat{H}_0 t/\hbar} |\tilde{\psi}_t\rangle \leftarrow \psi_I$$

Mit Hilfe der unitären Transformation:

$$\hat{V}_I(t) = e^{i\hat{H}_0 t/\hbar} \hat{V}(t) e^{-i\hat{H}_0 t/\hbar}$$

lässt sich die S-Gleichung (*) schreiben:

$$(**) \qquad i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\tilde{\psi}_t\rangle = \hat{V}_I(t) |\tilde{\psi}_t\rangle$$

Formale Lösung: (integrieren)

$$|\tilde{\psi}_t\rangle = |\tilde{\psi}_{t_0}\rangle + \frac{1}{i\hbar}\int_{t_0}^{t} dt'\, \hat{V}_I(t')\, |\tilde{\psi}_{t'}\rangle$$

Iteratives Einsetzen führt auf die Reihe:

$$|\tilde{\psi}_t\rangle = |\tilde{\psi}_{t_0}\rangle + \frac{1}{i\hbar}\int_{t_0}^{t} dt'\, \hat{V}_I(t')\, |\tilde{\psi}_{t_0}\rangle + \frac{1}{(i\hbar)^2}\int_{t_0}^{t} dt' \int_{t_0}^{t'} dt''\, \hat{V}_I(t')\, \hat{V}_I(t'')\, |\tilde{\psi}_{t_0}\rangle + \dots =$$

$$= \left[1 + \frac{1}{i\hbar}\int_{t_0}^{t} dt'\, \hat{V}_I(t') + \frac{1}{(i\hbar)^2}\int_{t_0}^{t} dt' \int_{t_0}^{t'} dt''\, \hat{V}_I(t')\, \hat{V}_I(t'') + \dots \right] |\tilde{\psi}_{t_0}\rangle$$

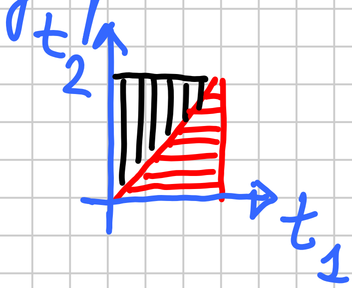
Betrachten wir den n-ten Term: $(t \geq t_1 \geq t_2 \dots \geq t_n \geq t_0)$

$$\frac{1}{(i\hbar)^n}\int_{t_0}^{t} dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 \int_{t_0}^{t_2} dt_3 \dots \int_{t_0}^{t_{n-1}} dt_n\, \hat{V}_I(t_1)\, \hat{V}_I(t_2) \dots \hat{V}_I(t_n) =$$

$$= \frac{1}{n!}\frac{1}{(i\hbar)^n}\, \hat{T}_t \int_{t_0}^{t} dt_1 \int_{t_0}^{t} dt_2 \int_{t_0}^{t} dt_3 \dots \int_{t_0}^{t} dt_n\, \hat{V}_I(t_1)\, \hat{V}_I(t_2) \dots V_I(t_n)$$

wobei $\hat{T}_t$ - Zeitordnungsoperator

Faktor: $\frac{1}{n!}$:



Daher können wir die Reihe kompakt darstellen:

$$|\tilde{\psi}_t\rangle = \left[\underline{\hat{T}_t}\, e^{-\frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t} dt'\,\hat{V}(t')}\right] |\tilde{\psi}_{t_0}\rangle$$

→ Quantenfeldtheorie $[\vec{\hat{U}}(t,t_0)]$ - Zeitentwicklungsoperator

2.5 Störungsrechnung 1. Ordnung - "Goldene Regel"

Das System sei anfangs im Eigenzustand:

$$|m,t\rangle = e^{-i\hat{H}_0 t/\hbar}|m\rangle = e^{-iE_m t/\hbar}|m\rangle$$

$$|m,t\rangle \equiv |m_t\rangle$$

Für $t > t_0$: $\hat{V}(t)$ ⤳ $|m\rangle \uparrow |n\rangle$ P_{mn} - ? Wahrscheinlichkeit.

Übergang - in den stationären Zustand $|n\rangle$:

$$|n,t\rangle = e^{-i\hat{H}_0 t/\hbar}|n\rangle = e^{-iE_n t/\hbar}|n\rangle$$

Mit $\hat{V}(t)$: $|m,t\rangle \xrightarrow{\hat{V}} |\psi,t\rangle$

Die Wahrscheinlichkeitsamplitude für diesen Übergang ist.

$$\langle n,t|\psi,t\rangle = \underbrace{\langle n|\, e^{i\hat{H}_0 t/\hbar}}_{\langle n,t|}|\psi,t\rangle = \langle n|\underbrace{\tilde{\psi},t}_{\text{"}\psi_I\text{"}}\rangle$$

In der WW-Darstellung (I):

$$|\tilde{\psi}^0,t\rangle = e^{i\hat{H}_0 t/\hbar}|m,t\rangle = |m\rangle$$

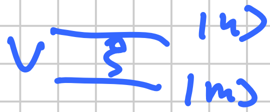
Für Zeitentwicklung - 1. Ordnung in $\hat{V}_I(t)$:

$$|\tilde{\psi},t\rangle = |m\rangle + \frac{1}{i\hbar}\int_{t_0}^{t} dt'\, \hat{V}_I(t')|m\rangle$$

Übergangsamplitude:

$$\langle n,t|\psi,t\rangle = \delta_{nm} + \frac{1}{i\hbar}\int_{t_0}^{t} dt' \langle n|\hat{V}_I(t')|m\rangle =$$

$$= \delta_{n,m} + \frac{1}{i\hbar}\int_{t_0}^{t} dt'\, e^{i(E_n-E_m)t'/\hbar}\langle n|\hat{V}(t')|m\rangle$$

Übergangswahrscheinlichkeit: $(n\neq m)$ 

$$P_{mn}(t) = |\langle n,t|\psi,t\rangle|^2 = \left|\frac{1}{\hbar}\int_{t_0}^{t} dt'\, e^{i(E_n-E_m)t'/\hbar}\langle n|\hat{V}(t')|m\rangle\right|^2$$

Wir betrachten: plötzlich eingeschaltetes Potential 

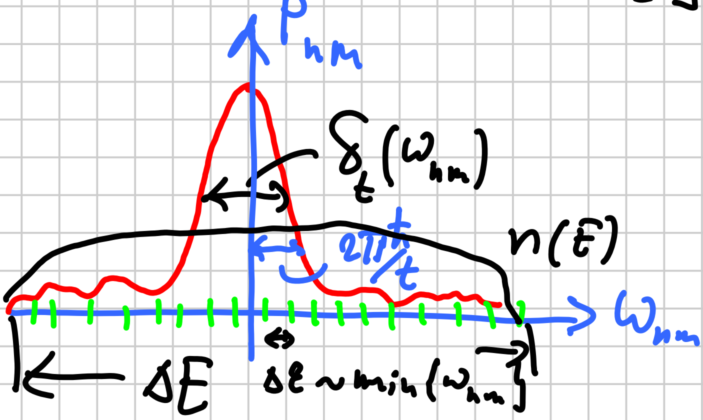
$$\hat{V}(t) = \hat{V}\,\theta(t)$$

dann:

$$P_{nm}(t) = \frac{1}{\hbar^2}\left|\int_0^t dt'\, e^{i\omega_{nm}t'}\langle n|\hat{V}|m\rangle\right|^2 = \frac{1}{\hbar^2}|\langle n|V|m\rangle|^2\left[\frac{\sin\left(\frac{\omega_{nm}t}{2}\right)}{\omega_{nm}/2}\right]^2$$

wobei $\omega_{nm} = (E_n-E_m)/\hbar$

$$\delta(\omega) = \lim_{t\to\infty}\frac{1}{2\pi t}\left[\frac{\sin(\omega t/2)}{\omega/2}\right]^2$$



Langzeit-Übergangsrate: (Fermi - "Goldene Regel")

$$\Gamma_{m\to n} = \lim_{t\to\infty} \frac{P_{nm}(t)}{t} = \frac{2\pi}{\hbar} \delta(E_n - E_m) \left| \langle n | \hat{V} | m \rangle \right|^2$$

(hergeleitet von W. Pauli, 1928)

Für kontinuierliches Spektrum – mit Zustandsdichte – $n(E)$

Die Übergangsrate in alle möglichen Zustände:

$$\Gamma_m = \sum_n \Gamma_{m\to n} = \int dE_n \, n(E_n) \Gamma_{m\to n} = \frac{2\pi}{\hbar} n(E_m) \left| \langle n | \hat{V} | m \rangle \right|^2$$

Bedingungen: $\frac{2\pi\hbar}{\Delta E} \leq t \leq \frac{2\pi\hbar}{\delta\varepsilon}$ $\left(\Delta E \gg \frac{2\pi\hbar}{t} \gg \delta\varepsilon \right)$

Periodische Störung:

$$\hat{V}(t) = \theta(t) \left[\hat{V} e^{-i\omega t} + \hat{V}^\dagger e^{+i\omega t} \right]$$

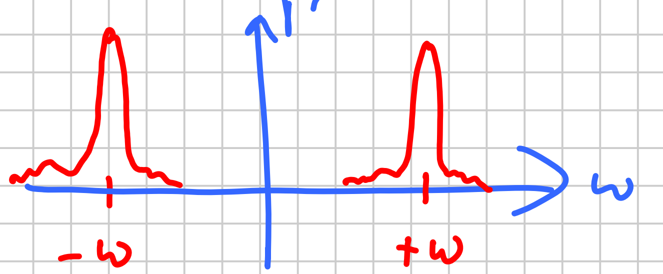
1\. Ordnung:

$$\langle n, t | \psi, t \rangle = \frac{1}{i\hbar} \int_0^t dt' \left[e^{i(\omega_{nm} - \omega)t'} \langle n | \hat{V} | m \rangle + e^{i(\omega_{nm} + \omega)t'} \langle n | \hat{V}^\dagger | m \rangle \right]$$

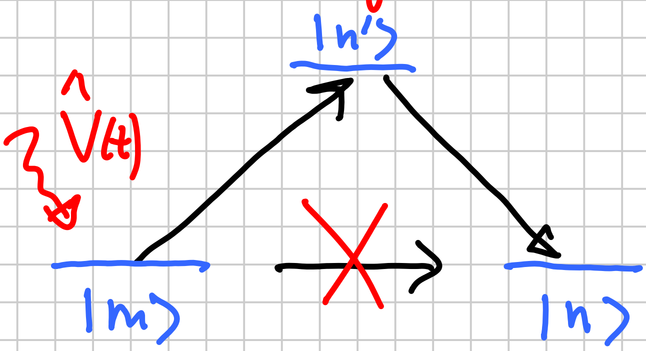
$\Downarrow$ $\delta(\ -\ )$ $\qquad$ $\Downarrow$ $\delta(\ +\ )$

Übergangsrate:

$$\Gamma_{mn} = \frac{2\pi}{\hbar} \left[\delta(E_n - E_m - \hbar\omega) \left| \langle n | \hat{V} | m \rangle \right|^2 + \delta(E_n - E_m + \hbar\omega) \left| \langle n | \hat{V}^\dagger | m \rangle \right|^2 \right]$$



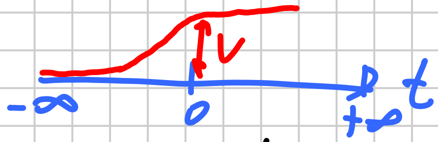
2.6 "Verbotene Übergänge" als Zweitordnungsprozesse



Übergänge 1. Ordnung, mit $\langle m|\hat{V}|n\rangle = 0$ "Verboten"

Umweg! $|m\rangle \to |n\rangle$ mit Hilfe von $|n'\rangle$

2. Ordnung: (Adiabatisch)



$$\hat{V}(t) = \hat{V}\, e^{\eta t} \quad \text{mit } 0 < \eta \ll 1$$

$$V(t) \to 0 \,,\; t \to -\infty$$

$$\langle n|\tilde{\psi},t\rangle = \frac{1}{(i\hbar)^2} \int_{t_0}^{t} dt' \int_{t_0}^{t'} dt'' \sum_{n'} \langle n|\hat{V}|n'\rangle e^{i(E_n - E_{n'})t'/\hbar + \eta t'} \, *$$

$$* \langle n'|\hat{V}|m\rangle e^{i(E_{n'} - E_m)t''/\hbar + \eta t''}$$

mit $n' \neq n, m$ $\quad (\langle n|V|m\rangle = 0)$

Setzen: $t_0 = -\infty$ und Integral ausführen:

$$\langle n|\tilde{\psi},t\rangle = e^{i(E_m - E_n)} \frac{e^{2\eta t}}{E_m - E_n + 2i\hbar\eta} \sum_{n'} \frac{\langle n|\hat{V}|n'\rangle\langle n'|\hat{V}|m\rangle}{E_m - E_{n'} + i\hbar\eta}$$

Übergangsrate $(\eta \to 0)$

$$\Gamma_{m\to n} = \frac{2\pi}{\hbar}\, \delta(E_n - E_m) \left| \sum_{n'} \frac{\langle n|\hat{V}|n'\rangle\langle n'|V|m\rangle}{E_m - E_{n'} + i\hbar\eta} \right|^2$$

Interferenzen!

2.7 Wechselwirkung mit dem Strahlungsfeld

$\begin{cases}\rho=0\\ \vec{j}=0\end{cases}$ $\hbar\omega$

Hamilton-Operator-N-Elektronen (kein $\vec{S}$) im elektromagnetischen Feld $(\Phi, \vec{A})$:

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^{N} \left\{ \frac{1}{2m} \left[\vec{p}_i - \frac{e}{c} \vec{A}(\vec{r}_i, t) \right]^2 + e\Phi(\vec{r}_i, t) + U(\vec{r}_i) \right\}$$

$$\hat{H}_0 = \sum_{i=1}^{N} \left(\frac{\vec{p}_i^{\,2}}{2m} + U(\vec{r}_i) \right) , \qquad \hat{V}(t) = ?$$

$\vec{A}(\vec{r}_i, t)$ – Vektorpotential ; $\quad \vec{B} = \vec{\nabla} \times \vec{A}$ – Magnet-Feld

$\phi(\vec{r}, t)$ – Skalarpotential : $\quad \vec{E} = -\vec{\nabla}\phi - \frac{1}{c}\frac{\partial \vec{A}}{\partial t}$ – Elektrische

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

Abwesenheit von E-M Quellen : $\rho = 0 \quad \vec{j} = 0 \quad (\phi = 0)$

$$\vec{\nabla}^2 \phi = -4\pi\rho \rightarrow \phi(\vec{r}, t) = \int d\vec{r}\,' \frac{\rho(\vec{r}\,', t)}{|\vec{r} - \vec{r}\,'|} = 0$$

Dann: $\vec{E} = -\frac{1}{c}\dot{\vec{A}} , \quad \vec{B} = \vec{\nabla} \times \vec{A}$

Zeitabhängige Wechselwirkung:

$$\hat{V}(t) = \sum_{i=1}^{N} \left[-\frac{e}{2mc} \{ \vec{p}_i , \vec{A}(\vec{r}_i, t) \} + \frac{e^2}{2mc^2} \vec{A}^2(\vec{r}_i, t) \right]$$

$\{\ ,\ \} = [\ ,\ ]_+$

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

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

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

$A^2 \ll |\vec{A}|$

Quantisierung des Strahlungsfeldes

Wellengleichung für $\vec{A}$:

$$\Box = \frac{1}{c^2}\frac{\partial^2}{\partial t^2} - \vec{\nabla}^2$$

$$\Box \vec{A} = \frac{4\pi}{c}\vec{j}_{ext.} = 0 \quad \text{mit} \quad \vec{\nabla}\cdot\vec{A} = 0$$

Lösung:

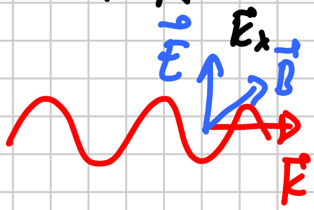
$$\vec{A}(\vec{r},t) = \frac{1}{\sqrt{V}}\sum_{\vec{k},\lambda}\left(a_{\vec{k}\lambda}\vec{e}_{\vec{k}\lambda}\, e^{i\vec{k}\vec{r}-i\omega_{\vec{k}}t} + a^*_{\vec{k},\lambda}\vec{e}^{\,*}_{\vec{k},\lambda}\, e^{-i\vec{k}\vec{r}+i\omega_{\vec{k}}t}\right)$$

mit: $\vec{e}_{\vec{k}\lambda}$ – Polarisationsvektor zum Wellenvektor $\vec{k}$

mit Index $\lambda = \{1,2\}$: $\vec{e}_{\vec{k}\lambda}\cdot\vec{e}_{\vec{k}\lambda'} = \delta_{\lambda\lambda'}$

Wegen $\vec{\nabla}\cdot\vec{A} = 0$ ist die Polarisation ist trasversal: $\vec{k}\cdot\vec{e} = 0$

Dispersion: $\omega_{\vec{k}} = c|\vec{k}| \equiv ck$



Energie des Strahlungsfeldes:

$$\hat{H}_{str} = \frac{1}{8\pi}\int d\vec{r}\left(\vec{E}^2+\vec{B}^2\right) \underset{|\vec{E}|=|\vec{B}|}{\overset{EMW}{=}} \int d\vec{r}\,\frac{\vec{E}^2}{4\pi} \underset{\vec{E}=\frac{\dot{\vec{A}}}{c}}{=} \sum_{\vec{k},\lambda}\frac{\omega_k^2}{2\pi c^2}|a_{\vec{k}\lambda}|^2$$

Quantisierung:
(Analog zum Oszillator)

$$a_{\vec{k},\lambda} \to \sqrt{\frac{2\pi\hbar c^2}{\omega_k}}\,\hat{a}_{\vec{k},\lambda} \quad \text{Photonen}$$

$$a^*_{\vec{k},\lambda} \to \sqrt{\frac{2\pi\hbar c^2}{\omega_k}}\,\hat{a}^+_{\vec{k},\lambda}$$

mit:

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

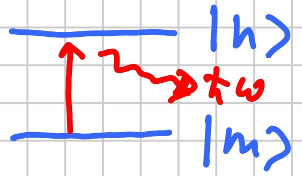
Hamilton-Operator:

$$\hat{H}_{str} = \sum_{\vec{k},\lambda}\hbar ck\left(\hat{a}^+_{\vec{k},\lambda}\hat{a}_{\vec{k},\lambda} + \frac{1}{2}\right)$$

Der gesamte Hamilton-Operator: $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_{str} + \hat{V}(t)$

Spontane Emission eines Photons

Atom:



$|0\rangle$ – Photonen Vakuum

Grundzustand: $\quad |0\rangle |m\rangle$

Endzustand: $\quad \hat{a}^{+}_{\vec{k}\lambda} |0\rangle |n\rangle$

WW-pot. $(|\vec{A}| \gg \vec{A}^2)$

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

mit $\quad \vec{j}_{\vec{k}} = \int d\vec{r}\, \vec{j}(\vec{r}) e^{-i\vec{k}\vec{r}} \quad$ (FT)

Für Atom: $\quad \vec{k}\cdot\vec{r} \sim |\vec{k}| \cdot a_B \ll 1$, $\quad |\vec{k}| \sim \frac{1}{\lambda_{EM}}$

Übergangsrate: (wegen: $\hat{a}_{k\lambda}|0\rangle = 0$) $\quad \langle 0| a\, a^{+} |0\rangle \neq 0$

$$\Gamma_{m\to n,\vec{k}\lambda} = \frac{(2\pi)^2 e^2}{kc} \delta(E_m - E_n - \hbar\omega_{\vec{k}\lambda}) \left| \langle n | \vec{j}_{\vec{k}} \cdot \vec{e}^{\,*}_{\vec{k}\lambda} | m \rangle \right|^2$$

Entwicklung: $(\vec{k}\vec{r} \ll 1)$

$$\langle n | \vec{j}_{-k} | m \rangle = \langle n | \int d\vec{r} \left(1 + i\vec{k}\vec{r} + \tfrac{1}{2}(i\vec{k}\vec{r})^2 + \dots\right) \vec{j}(\vec{r}) | m \rangle$$

$$= \langle n | \vec{j}_0 | m \rangle + i \langle n | \int d\vec{r}\, (\vec{k}\cdot\vec{r})\, \vec{j}(\vec{r}) | m \rangle + \dots$$

elektrischer Dipol + mag. Dipol, elektr. Quadrupol u.s.w.

Elektrische Dipolübergänge: $\quad \vec{j}_0 = \int d\vec{r}\, \vec{j}(\vec{r}) = \frac{\vec{P}}{m}, \quad \vec{P} = \sum_i \vec{P}_i$ Gesamtimpuls

Bewegungsgleichung: $\quad \frac{\vec{P}}{m} = \frac{i}{\hbar}[\hat{H}_0, \vec{R}]$, mit $\vec{R} = \sum_i \vec{r}_i$

$$\langle n | \vec{j}_0 | m \rangle = \frac{i}{\hbar} \langle n | [\hat{H}_0, \vec{R}] | m \rangle = \frac{i}{\hbar}(E_n - E_m) \langle n | \vec{R} | m \rangle$$

$\vec{B}_{nm}$ – Dipolmatrixelement