

Zusammenhang mit dem Wechselwirkungsbild

Für $t=0$ stimmen Schrödinger- u. WW-Bild überein.

$$\hat{H}_W^1(t) = e^{\frac{i}{\hbar} \hat{H}^0 t} \hat{H}_S^1 e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}^0 t}$$

(Zeitentw. der Op. mit \hat{H}^0)

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\psi\rangle_W = \hat{H}_W^1(t) |\psi\rangle_W$$

(Zeitentw. der Zustände mit \hat{H}_W^1)

WW-Bild

↓ formale Integration → Integralgl.

$$|\psi\rangle_W(t) = \underbrace{|\psi\rangle_W(t=0)}_{|u_0\rangle} - \frac{i}{\hbar} \int_0^t d\tau (\hat{H}_W^1(\tau) |\psi\rangle_W(\tau))$$

$$\approx \left(1 - \frac{i}{\hbar} \int_0^t \hat{H}_W^1(\tau) d\tau \right) |u_0\rangle \quad \text{Int. für "kleine" } \hat{H}_W^1$$

$$= \left(1 - \frac{i}{\hbar} \int_0^t d\tau e^{\frac{i}{\hbar} \hat{H}^0 \tau} \hat{H}_S^1(\tau) e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}^0 \tau} \right) |u_0\rangle$$

$$|\psi\rangle_S = e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}^0 t} |\psi\rangle_W$$

$$\approx e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}^0 t} \left(1 - \frac{i}{\hbar} \int_0^t d\tau e^{\frac{i}{\hbar} \hat{H}^0 \tau} \hat{H}_S^1 e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}^0 \tau} \right) |u_0\rangle$$

$U(t,0)$ Zeitentw. op. im Schrödinger-Bild

Übergangsamplitude (im Schrödinger-Bild)

$$\begin{aligned}
c_n(t) &= \langle n | \psi \rangle = \langle n | U(t,0) | n_0 \rangle \\
&= \langle n | e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}^0 t} \left(1 - \frac{i}{\hbar} \int_0^t dt' e^{\frac{i}{\hbar} \hat{H}^0 t'} \hat{H}'_1 e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}^0 t'} \right) | n_0 \rangle \\
&= e^{-\frac{i}{\hbar} E_n t} \left(\underbrace{\delta_{nn_0}}_{g_n^{(0)}} - \underbrace{\frac{i}{\hbar} \int_0^t dt' e^{\frac{i}{\hbar} E_{n_0} t'} \langle n | \hat{H}'_1 | n_0 \rangle e^{-\frac{i}{\hbar} E_n t'}}_{\varepsilon g_n^{(1)}} \right) \\
&= e^{-\frac{i}{\hbar} E_n t} g_n(t)
\end{aligned}$$

in Übereinstimmung mit der zeitabh. Stör.rechn. 1. Ordnung.

5.2 Induzierte Emission und Absorption von Lichtquanten in Atomen

El. im kugelsymm. Pot. $V(r)$ eines Atomkerns:

$$\hat{H}^0 = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(r)$$

unter dem Einfluss einer el. magn. Welle mit

$$\underline{A}(r,t) = \underline{A}_0 \cos(k \cdot r - \omega t) \quad \omega = c|k|$$

so dass

$$\nabla \cdot \underline{A} = 0 \quad \text{Coulomb-Eichung}$$

$$\underline{E}(r,t) = -\frac{\partial}{\partial t} \underline{A}(r,t) = -\omega \underline{A}_0 \sin(k \cdot r - \omega t)$$

$$\underline{B}(r,t) = \nabla \times \underline{A}(r,t) = -\underline{k} \times \underline{A}_0 \sin(k \cdot r - \omega t)$$

Hamilton-Op.

$$\hat{H} = \hat{H}^0 - \frac{e}{m} \underline{A} \cdot \hat{p} = \hat{H}^0 + \hat{H}'$$

mit $\hat{H}' = -\frac{e}{m} \cos(k \cdot r - \omega t) \underline{A}_0 \cdot \hat{p}$

$$= \underbrace{-\frac{e}{2m} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} \underline{A}_0 \cdot \hat{p}}_{\hat{F}} e^{-i\omega t} - \underbrace{\frac{e}{2m} e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} \underline{A}_0 \cdot \hat{p}}_{\hat{F}^\dagger} e^{i\omega t}$$

Übergangswahrscheinl. pro Zeit von $n_0 \rightarrow n$

$$W_{nn_0} = \frac{2\pi}{\hbar} \left(\frac{e}{2m}\right)^2 \left\{ |\langle n | e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \hat{A}_0 \hat{p} | n_0 \rangle|^2 \delta(E_n - E_{n_0} - \hbar\omega) + |\langle n_0 | e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \hat{A}_0 \hat{p} | n \rangle|^2 \delta(E_n - E_{n_0} + \hbar\omega) \right\}$$

Dipolnäherung

(i) Annahme: Wellenlänge $\lambda \gg$ Atombeschwerer (einige λ)

$$\Rightarrow k \cdot r \ll 1 \Rightarrow e^{\pm i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} = 1 + O(k \cdot r)$$

(ii) $[\hat{H}^0, \hat{\mathbf{r}}] = \frac{\hbar}{i} \frac{\mathbf{p}}{m}$; $e\hat{\mathbf{r}} = \text{Op. des el. Dipolmoments}$

Damit wird das Matrixelement des StörOp.

$$-\frac{e}{2m} \langle n | e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \hat{A}_0 \hat{p} | n_0 \rangle \approx -\frac{i}{\hbar} \frac{e\omega}{2\mu} \langle n | \hat{H}^0 \hat{\mathbf{r}} - \hat{\mathbf{r}} \hat{H}^0 | n_0 \rangle$$

$$= -\frac{i}{\hbar} \frac{1}{2} (E_n - E_{n_0}) \hat{A}_0 e \langle n | \hat{\mathbf{r}} | n_0 \rangle$$

Übergangswahrscheinl.:

$-\frac{E_n - E_{n_0}}{\omega}$ el. Dipolmatrixelement $d_{nn_0} = \mu$

$$W_{nn_0} = \frac{2\pi}{\hbar} \underbrace{\frac{(E_n - E_{n_0})^2}{4(\hbar\omega)^2}}_{\frac{1}{4} \text{ (Resonanz)}} \left(\epsilon_0 \cdot d_{nn_0} \right)^2 \left\{ \delta(E_n - E_{n_0} - \hbar\omega) + \delta(E_n - E_{n_0} + \hbar\omega) \right\}$$

Kontinuierliches Einstrahlungsspektrum:

$$\underline{\mathbf{E}}(\mathbf{r}, t) = \int_0^\infty d\omega \underline{\mathbf{E}}_0(\omega) \sin(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r} - \omega t)$$

$$\Rightarrow W_{nn_0} = \frac{\pi}{2\hbar^2} \int_0^\infty d(\hbar\omega) \left(\underline{\mathbf{E}}_0(\omega) \cdot d_{nn_0} \right)^2 \left\{ \delta(E_n - E_{n_0} - \hbar\omega) + \delta(E_n - E_{n_0} + \hbar\omega) \right\}$$

Beitrag für $E_n > E_{n_0}$

$E_n < E_{n_0}$

Absorption

induz. Em.

da $\sim \epsilon_0^2$
 \sim Energie der el. mag. Welle

$$= \frac{\pi}{2\hbar^2} \left(\epsilon_0 \left(\frac{|E_n - E_{n_0}|}{\hbar} \right) \cdot d_{nn_0} \right)^2$$

mit $d_{nn_0} = e \langle n | \hat{\mathbf{r}} | n_0 \rangle$

Bemerkungen

(1) Spontane Em. kann in der semi-class. Theorie (Atom gm., Strahlungsfeld klass.) nicht beschrieben werden. Hierzu ist die Quantisierung des Strahlungsfeldes nötig.

(2) Auswahlregeln für erlaubte elektrische Dipolstrahlung sind durch das Dipolmatrixelement $\langle n | \hat{r} | n_0 \rangle$ gegeben. Für $\langle n | \hat{r} | n_0 \rangle = 0$ können erlaubte Multipolübergänge (magn. Dipol, el. Quadrupol usw.) durch Entwicklung von $e^{\pm ikz}$ in höherer Ordnung berechnet werden.

Diskussion der Dipolmatrixelemente

Ungestörte Wellenfkt. $\psi_{nlm}(r) = \frac{u_{nl}(r)}{r} Y_l^m(\vartheta, \varphi)$

$$|n\rangle \triangleq |n' l' m'\rangle$$

$$|n_0\rangle \triangleq |n l m\rangle$$

$$\sim P_l^m(\cos \vartheta) e^{im\varphi}$$

Kugelkoordin. $x_1 = r \sin \vartheta \cos \varphi$
 $x_2 = r \sin \vartheta \sin \varphi$
 $x_3 = r \cos \vartheta$

Betrachte $\xi = x_1 + ix_2 = r \sin \vartheta e^{i\varphi}$

$$\xi^* = x_1 - ix_2 = r \sin \vartheta e^{-i\varphi}$$

$$\langle n' l' m' | \hat{\xi} | n l m \rangle \sim \underbrace{\int_0^\pi d\vartheta \sin^2 \vartheta P_{l'}^{m'}(\cos \vartheta) P_l^m(\cos \vartheta)}_0 \underbrace{\int_0^{2\pi} d\varphi e^{i(m-n'+\varphi)}}_0$$

$$\underbrace{\int_0^\pi d\vartheta \sin^2 \vartheta P_{l'}^{m+1}(\cos \vartheta) P_l^m(\cos \vartheta)}_0 \sim \delta_{m', m+1}$$

Analog: $\sim \delta_{l', l \pm 1}$

$$\langle n' l' m' | \hat{S}^x | n l m \rangle \sim \delta_{l', l \pm 1} \delta_{m', m-1}$$

$$\langle n' l' m' | x_3 | n l m \rangle \sim \delta_{l', l \pm 1} \delta_{m m'}$$

Dipol-erlaubte Übergänge:

$$\Delta l = \pm 1$$

$$\Delta m = 0, \pm 1$$