

Atome, Licht und ihre Wechselwirkung

Priv. Doz. Dr. Karl-Peter Marzlin

WS 2002/2003

Inhaltsverzeichnis

1	Maxwell-Gleichungen und Eichfelder	1
1.1	Die Maxwell-Gleichungen	1
1.2	Skalares Potential und Vektorpotential	3
1.3	Eichtransformationen	4
1.4	Multipolentwicklung	6
1.5	Elektrodynamik in dielektrischen Medien	10
1.6	Makroskopische Maxwell-Gleichungen	12
1.7	Ebene Wellen	15
2	Quantenfeldtheorie des Lichts - QED	19
2.1	Vielteilchentheorie in der Quantenmechanik	19
2.1.1	Fock-Raum und Teilchenzahldarstellung	20
2.1.2	Erzeuger und Vernichter	22
2.1.3	Der Feldoperator	23
2.1.4	Zweite Quantisierung	25
2.1.5	Zusammenfassung der Konstruktion einer Vielteilchentheorie	26
2.1.6	Quantisierung in Coulomb-Eichung	27
2.2	Kohärente Zustände	33
2.3	Klassische und quantenmechanische Interferenz	37
2.4	Bemerkungen zum Problem der Quantisierung in anderen Eichungen	39
3	Quantenmechanik der Atome: ein kurzer Überblick	41
3.1	Das Wasserstoffatom, Parität	41
3.2	Feinstruktur und Spin	42
3.3	Hyperfeinstruktur	43
4	Die Wechselwirkung von Atomen und Licht	45
4.1	Die minimale Kopplung	45
4.1.1	Herleitung der minimalen Kopplung	45
4.1.2	Eichinvarianz der minimalen Kopplung	47
4.2	Die Power-Zienau-Woolley-Transformation	48
4.2.1	Das Grundprinzip der Transformation	48
4.2.2	Die vollständige Transformation	49

4.3	Dipolnherung und Dipolkopplung	57
4.4	Auswahlregeln fr Atome	58
5	Das 2-Niveau Modell fr Atome	63
5.1	Herleitung des 2-Niveau Systems	64
5.1.1	Darstellung von Operatoren	65
5.1.2	Kopplung eines 2-Niveau-Atoms an ein elektromagnetisches Feld	66
5.2	Rabi-Oszillationen und Landau-Zener-bergnge	69
5.2.1	Landau-Zener-bergnge	73
5.3	Dressed States	75
5.3.1	Dressed States in einer Cavity	76
5.4	Modelle mit wenigen Niveaus, Dunkelzustnde, Raman-bergnge	79
5.4.1	Dunkelzustnde (Dark States)	79
5.4.2	Raman-bergnge	84
5.5	Adiabatisches Theorem, STIRAP	86
5.5.1	Anwendung des adiabatischen Theorems auf Dunkelzustnde	87
6	Atomoptik	89
6.1	Grundlegendes Prinzip	89
6.2	Atom-Interferometrie	91
6.2.1	Ramsey-Bord-Interferometer (Bord 1988, Riehle 1991)	91
6.2.2	Atomic fountain (Kasevich & Chu 1991)	93
6.3	Optische Potentiale	94
6.3.1	Laufender Laser mit Gau-Profil	95
6.3.2	Stehender Doughnut-Laser	95
6.3.3	Evaneszente Lichtfelder	96
6.3.4	Linse fr einen Atomstrahl	96
7	Inkohrente Wechselwirkung und Dichtematrix	99
7.1	Dichtematrix-Formalismus	99
7.2	Liouville-Gleichung, Superoperatoren	102
7.3	Reduzierte Dichtematrix, Zwanzigs Master-Gleichung	105
7.3.1	Reduzierte Dichtematrix, Projektions-Superoperatoren	106
7.3.2	Zwanzigs Master-Gleichung	107
7.4	Spontane Emission	114
7.5	Vermeidung spontaner Emission durch Interferenz	120
8	Laser-Khlen von Atomen	123
8.1	Allgemeines zur Khlung von Atomen	123
8.2	Doppler-Khlung	123
8.2.1	Das Prinzip	124
8.2.2	Theoretische Beschreibung	124
8.3	VSCPT	127

9	Elektromagnetisch induzierte Transparenz	129
9.1	Maxwell-Bloch-Gleichungen	129
9.2	Der Brechungsindex von 2-Niveau-Atomen	130
9.3	Elektromagnetisch induzierte Transparenz und Dunkelzustände	133
10	Photonische Bandlücken	137
11	Bose-Einstein-Kondensate	143
11.1	Vielteilchentheorie bosonischer Atome	143
11.2	Der Bose-Einstein-Phasenübergang	145
11.3	Atome mit Wechselwirkung, kollektive Wellenfunktion	147
11.4	Einfache Anwendungen der Gross-Pitaevskii-Gleichung	150
11.4.1	BECs in harmonischen Fallen , Thomas-Fermi-Näherung	150
11.4.2	Solitonen	151
12	Einschübe	153
12.1	Greenfunktion	153
12.2	Addition von Drehimpulsen	153
12.2.1	Weitere Darstellung der Addition von Drehimpulsen	155
12.3	Distributionen	157

Vorwort

Das vorliegende Skript ist aus einer Vorlesung hervorgegangen, die ich im Wintersemester 2002/03 an der Universität Konstanz gehalten habe. Die Grundidee der Veranstaltung war, die vielen verschiedenen Aspekte der Quanten- und Atomoptik auf drei grundlegende Modelle zurückzuführen: Das Zwei- und das Drei-Niveau-Atom sowie den harmonischen Oszillator.

Entsprechend ist das Skript angelegt. Nach einem Rückblick auf den Stoff aus Kursvorlesungen (Kapitel 1 und 3) werden die theoretischen Grundlagen der Quantenoptik in Kapitel 2 und 4 behandelt. In Kapitel 5 werden das 2-Niveau- und das 3-Niveau-Modell ausführlich besprochen und die fundamentalen Effekte vorgestellt, die in solchen Systemen auftreten. In Kapitel 6 werden diese Modelle um die Schwerpunktbewegung erweitert, in Kapitel 7 tritt die Kopplung an ein Reservoir hinzu. Beide Erweiterungen werden in Kapitel 8 zur Beschreibung der Laser-Kühlung von Atomen benötigt und bilden auch die Grundlage für die verschiedenen Anwendungen in Kapitel 9-11.

Dieses Skript ist Dank des Engagements der Studierenden entstanden, die diesen Kurs besucht haben. Viele von Ihnen haben beim Tippen des Manuskripts geholfen. Auch haben ihre Fragen und Bemerkungen während der Vorlesung Teile des Stoffes sowie dessen Darstellung beeinflusst. Für ihre Mitarbeit und die herzliche Atmosphäre während der Vorlesung möchte ich Stefan Bretzel, Wolfgang Bührer, Martin Clausen, Claudia Gnahn, Peter Groß, Roland Haas, Christine Hartung, Corinna Maaß und Thomas Schluck sehr danken. Mein besonderer Dank gilt Wolfgang Bührer für seine Initiative, die Web-Seite www.atome-licht.de.vu zu erstellen und damit das Texen der Vorlesung zu koordinieren. Last not least ist es mir eine angenehme Pflicht, mich bei Martin Kiffner für das Korrektur-Lesen und bei Wolfram Quester für das Texen meines Skriptes zur Elektrodynamik zu bedanken, aus dem Kapitel 1 hervorgegangen ist. Möglicherweise wäre dieses Skript ohne diesen Anfang nicht entstanden.

Konstanz, im Mai 2003

Peter Marzlin

Kapitel 1

Maxwell-Gleichungen und Eichfelder

1.1 Die Maxwell-Gleichungen

Die beschreiben alle Phänomene, die mit (klassischen) elektrischen und magnetischen Feldern zu tun haben. Im *Vakuum* lauten sie:

$$\begin{aligned}\operatorname{div} \mathbf{E} &= \frac{\varrho}{\varepsilon_0} & \operatorname{div} \mathbf{B} &= 0 \\ \operatorname{rot} \mathbf{E} &= -\dot{\mathbf{B}} & \operatorname{rot} \mathbf{B} &= \mu_0(\mathbf{j} + \varepsilon_0 \dot{\mathbf{E}})\end{aligned}\tag{1.1}$$

Darin bezeichnet \mathbf{E} das elektrische und \mathbf{B} das magnetische Feld; $\varrho(\mathbf{x}, t)$ ist die Ladungs- und $\mathbf{j}(\mathbf{x})$ die Stromdichte. Die Divergenz und die Rotation einer Funktion $\mathbf{R}(\mathbf{x})$ sind dabei definiert als

$$\begin{aligned}\operatorname{div} \mathbf{R}(\mathbf{x}) &= \sum_{i=1}^3 \frac{\partial}{\partial x_i} R_i(\mathbf{x}) = \partial_i R_i(\mathbf{x}) \\ (\operatorname{rot} \mathbf{R}(\mathbf{x}))_i &= \sum_{j,k=1}^3 \epsilon_{ijk} \frac{\partial}{\partial x_j} R_k = \epsilon_{ijk} \partial_j R_k(\mathbf{x})\end{aligned}$$

Für die jeweils nach dem zweiten Gleichheitszeichen angegebene Kurzschreibweise wurde die Einsteinsche Summenkonvention verwendet, nach der über doppelt vorkommende Indizes zu summieren ist (hier von 1 bis 3). ϵ_{ijk} ist das antisymmetrische Levi-Civita-Symbol, das definiert ist als

$$\epsilon_{ijk} = \begin{cases} 1 & (ijk) = (123), (231), (312) \\ -1 & (ijk) = (132), (321), (213) \\ 0 & \text{sonst} \end{cases}$$

Aus dieser Definition folgt $\epsilon_{ijk} = \epsilon_{jki}$ und $\epsilon_{ijk} = -\epsilon_{jik}$.

Aus Konsistenzgründen muss die *Kontinuitätsgleichung* gelten:

$$\dot{\varrho} + \operatorname{div} \mathbf{j} = 0\tag{1.2}$$

Beweis:

$$\begin{aligned}
 \dot{\varrho} &= \varepsilon_0 \operatorname{div} \dot{\mathbf{E}} \\
 &= \varepsilon_0 \operatorname{div} \left(\frac{1}{\mu_0 \varepsilon_0} (\operatorname{rot} \mathbf{B} - \mu_0 \mathbf{j}) \right) \\
 &= \frac{1}{\mu_0} \operatorname{div} \operatorname{rot} \mathbf{B} - \operatorname{div} \mathbf{j} \\
 \operatorname{div} \operatorname{rot} \mathbf{B} &= \partial_i \epsilon_{ijk} \partial_j B_k = \underbrace{\epsilon_{ijk}}_{\text{antisym.}} \underbrace{\partial_i \partial_j}_{\text{sym.}} B_k = 0
 \end{aligned} \tag{1.3}$$

Die physikalische Bedeutung der Kontinuitätsgleichung liegt in der Ladungserhaltung:

$$\begin{aligned}
 Q(t) &= \int_V \varrho(\mathbf{x}, t) d^3x \\
 \Rightarrow \dot{Q} &= \int_V \dot{\varrho} d^3x = - \int_V \operatorname{div} \mathbf{j} d^3x
 \end{aligned}$$

Verwendet man nun den Gaußschen Satz,

$$\int_V \operatorname{div} \mathbf{R} d^3x = \oint_{\partial V} \mathbf{R} d\mathbf{s} \tag{1.4}$$

so sieht man, dass die Ladungsänderung im Volumen V gleich der Summe des Stroms ist, der aus V abfließt:

$$\dot{Q} = - \oint_{\partial V} \mathbf{j} d\mathbf{s} \tag{1.5}$$

Darin ist ∂V die Oberfläche (= der Rand) von V .

Aus den Maxwell-Gleichungen sollen nun Differentialgleichungen zweiter Ordnung abgeleitet werden:

$$\begin{aligned}
 (\operatorname{rot} \operatorname{rot} \mathbf{E})_i &= \epsilon_{ijk} \partial_j (\operatorname{rot} \mathbf{E})_k \\
 &= \epsilon_{ijk} \partial_j \epsilon_{klm} \partial_l E_m
 \end{aligned}$$

Benutzt man $\epsilon_{ijk} \epsilon_{klm} = \delta_{il} \delta_{jm} - \delta_{im} \delta_{jl}$, so ergibt sich:

$$\begin{aligned}
 (\operatorname{rot} \operatorname{rot} \mathbf{E})_i &= \delta_{il} \delta_{jm} \partial_j \partial_l E_m - \delta_{im} \delta_{jl} \partial_j \partial_l E_m \\
 \Rightarrow (\operatorname{rot} \operatorname{rot} \mathbf{E})_i &= \partial_i \partial_m E_m - \partial_l \partial_l E_i \\
 &= \nabla_i \operatorname{div} \mathbf{E} - \Delta E_i \\
 \operatorname{rot} \operatorname{rot} \mathbf{E} &= \nabla \operatorname{div} \mathbf{E} - \Delta \mathbf{E}
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 \Rightarrow \nabla \operatorname{div} \mathbf{E} - \Delta \mathbf{E} &= -\operatorname{rot} \dot{\mathbf{B}} = -\partial_t \mu_0 (\mathbf{j} + \varepsilon_0 \dot{\mathbf{E}}) \\
 \Rightarrow \frac{1}{\varepsilon_0} \nabla \varrho - \Delta \mathbf{E} &= -\mu_0 \partial_t \mathbf{j} - \varepsilon_0 \mu_0 \ddot{\mathbf{E}}
 \end{aligned}$$

Verwendet man

$$\varepsilon_0 \mu_0 = \frac{1}{c^2}$$

so folgt

$$\left(\frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} - \Delta \right) \mathbf{E} = -\mu_0 \frac{\partial}{\partial t} \mathbf{j} - \frac{1}{\varepsilon_0} \nabla \varrho \quad (1.6)$$

Der darin vorkommende d'Alembert-Operator $\left(\frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} - \Delta \right)$ wird häufig mit \square abgekürzt. Analog ergibt sich:

$$\begin{aligned} \ddot{\mathbf{B}} &= -\text{rot } \dot{\mathbf{E}} = -\text{rot } \frac{1}{\varepsilon_0 \mu_0} (\text{rot } \mathbf{B} - \mu_0 \mathbf{j}) \\ \Rightarrow \frac{1}{c^2} \ddot{\mathbf{B}} &= -(\nabla \underbrace{\text{div } \mathbf{B}}_{=0} - \Delta \mathbf{B}) + \mu_0 \text{rot } \mathbf{j} \\ \Rightarrow \left(\frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} - \Delta \right) \mathbf{B} &= \mu_0 \text{rot } \mathbf{j} \end{aligned} \quad (1.7)$$

Diese Gleichungen sind *Wellengleichungen*! Für sie kann man verschiedene Spezialfälle unterscheiden:

1. $\mathbf{j}, \varrho = 0 \Rightarrow$ Freie Wellenausbreitung, die Differentialgleichungen sind homogen und linear.
2. \mathbf{j}, ϱ sind vorgegeben \Rightarrow Die Theorie der dazugehörigen elektromagnetischen Felder behandelt inhomogene Differentialgleichungen und beschreibt die von Ladungen und Strömen ausgehenden Felder.
3. \mathbf{j}, ϱ hängen (näherungsweise) linear von \mathbf{E}, \mathbf{B} ab.
 \Rightarrow Lineare Dielektrika (polarisierbare Medien), führen zu linearen Differentialgleichungen.
4. \mathbf{j}, ϱ hängen nichtlinear von \mathbf{E}, \mathbf{B} ab.
 \Rightarrow Nichtlineare Differentialgleichungen, im allgemeinen schwer zu lösen. Nichtlineare Optik.

1.2 Skalares Potential und Vektorpotential

Eine der Maxwell-Gleichungen (1.1) lautet: $\text{div } \mathbf{B} = 0$ ($= \partial_i B_i$). Nach Gleichung (1.3) gilt allgemein: $\text{div rot } \mathbf{A} = 0$. Daher läßt sich das magnetische Feld auch schreiben als¹

$$\boxed{\mathbf{B} = \text{rot } \mathbf{A}} \quad \mathbf{A} = \text{Vektorpotential}$$

¹Wir sehen hier von Subtilitäten ab wie sie in mehrfach zusammenhängenden Raumgebieten auf Grund topologischer Phänomene auftreten können.

\mathbf{B} ist ein reines Wirbelfeld, d. h. es existieren keine magnetischen Quellen (= magnetische Monopole).

Setzt man das weiter in die Maxwell-Gleichungen (1.1) ein, so erhält man

$$\begin{aligned}\Rightarrow \operatorname{rot} \mathbf{E} &= -\dot{\mathbf{B}} = -\operatorname{rot} \dot{\mathbf{A}} \\ \Rightarrow \operatorname{rot} (\mathbf{E} + \dot{\mathbf{A}}) &= 0\end{aligned}$$

es gilt allgemein $\operatorname{rot} \operatorname{grad} \phi = \epsilon_{ijk} \partial_j \partial_k \phi = 0$

$$\begin{aligned}\Rightarrow \mathbf{E} + \dot{\mathbf{A}} &= -\nabla \phi && \text{in einfach zusammenhängendem Gebiet} \\ \Rightarrow \boxed{\mathbf{E} = -\nabla \phi - \dot{\mathbf{A}}} &&& \phi = \text{skalares Potential}\end{aligned}$$

Die Potentiale \mathbf{A} und ϕ sind nicht meßbar. Meßbar sind nur \mathbf{E} und \mathbf{B} . Allgemeine Bewegungsgleichungen für sie lauten:

$$\begin{aligned}\operatorname{div} \mathbf{E} &= \frac{\rho}{\epsilon_0} = -\operatorname{div} \operatorname{grad} \phi - \operatorname{div} \dot{\mathbf{A}} \\ \operatorname{rot} \mathbf{B} &= \operatorname{rot} \operatorname{rot} \mathbf{A} = \mu_0 (\mathbf{j} + \epsilon_0 [-\nabla \dot{\phi} - \ddot{\mathbf{A}}])\end{aligned}$$

$$\Rightarrow \boxed{\begin{aligned}\Delta \phi &= -\frac{\rho}{\epsilon_0} - \operatorname{div} \dot{\mathbf{A}} \\ \left(\frac{1}{c^2} \ddot{\mathbf{A}} - \Delta \mathbf{A} \right) + \nabla \operatorname{div} \mathbf{A} &= \mu_0 \mathbf{j} - \frac{1}{c^2} \nabla \dot{\phi}\end{aligned}} \quad (1.8)$$

Wäre $\operatorname{div} \mathbf{A} = 0$, so hätten wir die Poisson-Gleichung für ϕ und eine Wellengleichung für \mathbf{A} . ϕ spielt dann die Rolle des Coulomb-Potentials. Dies läßt sich tatsächlich erreichen.

1.3 Eichtransformationen

Durch $\mathbf{B} = \operatorname{rot} \mathbf{A}$ wird \mathbf{A} nicht eindeutig festgelegt. Wegen $\operatorname{rot} \operatorname{grad} \chi = 0$ für beliebiges χ führt

$$\mathbf{A}' = \mathbf{A} + \nabla \chi$$

zum selben \mathbf{B} -Feld. Ebenso führen ϕ und

$$\phi' = \phi - \partial_t \chi$$

zum gleichen \mathbf{E} -Feld, denn

$$\begin{aligned}\mathbf{E}' &= -\nabla \phi' - \dot{\mathbf{A}}' = -\nabla \phi + \nabla \dot{\chi} - \dot{\mathbf{A}} - \nabla \dot{\chi} \\ &= -\nabla \phi - \dot{\mathbf{A}} = \mathbf{E}\end{aligned}$$

Dies nennt man Eichtransformationen. Die physikalischen Felder \mathbf{E} , \mathbf{B} bleiben dabei unverändert. Eichtransformationen können dazu verwendet werden, bestimmte (bequeme) Bedingungen an die Potentiale zu stellen. Am gebräuchlichsten sind die folgenden:

$\begin{aligned} \operatorname{div} \mathbf{A} &= 0 && \text{Coulomb-Eichung} \\ \operatorname{div} \mathbf{A} + \frac{1}{c^2} \frac{\partial}{\partial t} \phi &= 0 && \text{Lorentz-Eichung} \end{aligned}$	(1.9)
---	-------

Beide sind voneinander unabhängig und nicht gleichzeitig zu erfüllen. Die erste führt zur Coulomb-Eichung, diese ist aber nicht kovariant. Die Lorentz-Eichung ist dagegen Lorentz-invariant und deswegen für die Relativitätstheorie wichtig.

Zur Herleitung der Coulomb-Eichung:

Seien \mathbf{A}' , ϕ' irgendwelche Potentiale. Gesucht ist ein χ , so dass $\operatorname{div} \mathbf{A} = 0$:

$$\mathbf{A} = \mathbf{A}' - \nabla \chi \implies \operatorname{div} \mathbf{A} = \operatorname{div} \mathbf{A}' - \Delta \chi \stackrel{!}{=} 0$$

Das ist eine Differentialgleichung für χ :

$$\Delta \chi = \operatorname{div} \mathbf{A}' \quad \text{Poisson-Gleichung für } \chi \quad (1.10)$$

Mit der Lösung

$$\chi(\mathbf{x}, t) = -\frac{1}{4\pi} \int \frac{\operatorname{div} \mathbf{A}'(\mathbf{x}')}{|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|} d^3 x'$$

Beweis:

$$\Delta_x \chi = -\frac{1}{4\pi} \int \operatorname{div} \mathbf{A}'(\mathbf{x}') \Delta_x \frac{1}{|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|} d^3 x'$$

Für die weitere Umformung benutzen wir folgenden wichtigen Satz:

$\Delta_x \frac{1}{ \mathbf{x} - \mathbf{x}' } = -4\pi \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}')$
--

Beweis:

$$\begin{aligned} \implies \Delta_x \chi &= -\frac{1}{4\pi} \int \operatorname{div} \mathbf{A}'(\mathbf{x}') (-4\pi) \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \\ &= \operatorname{div} \mathbf{A}'(\mathbf{x}) \end{aligned} \quad \text{qed.}$$

Setzt man die Coulomb-Eichung aus Gleichung (1.9) in Gleichung (1.8) ein, so erhält man die Feldgleichungen für die Potentiale in Coulomb-Eichung:

$\begin{aligned} \left(\frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} - \Delta \right) \mathbf{A} &= \mu_0 \mathbf{j} - \frac{1}{c^2} \nabla \dot{\phi} \\ \Delta \phi &= -\frac{\rho}{\varepsilon_0} \end{aligned}$	(1.11)
--	--------

Interpretation: $\phi \hat{=}$ Coulomb-Potential

$\mathbf{A} \hat{=}$ elektromagnetische Wellen

Achtung: Die Interpretation hängt von den Eichbedingungen ab!

1.4 Multipolentwicklung

Multipole sind ein *sehr* wichtiges Hilfsmittel der Elektrodynamik. Aus ihnen folgen z.B. die Auswahlregeln von Atomen und Molekülen in der Quantenmechanik.

In ihrem Kern ist die Multipolentwicklung eine Entwicklung nach Drehimpuls-Eigenzuständen wie in der Quantenmechanik.

Skalare Multipole

Beispiel: Skalares Potential in Lorentz-Eichung.

$$\square\phi(\mathbf{x}, t) = \frac{\varrho(\mathbf{x}, t)}{\varepsilon_0}$$

Zeitliche Fourier-Transformation:

$$\begin{aligned}\tilde{\phi}_\omega(\mathbf{x}) &= \int e^{-i\omega t} \phi(\mathbf{x}, t) dt \\ \Rightarrow (\Delta + k^2)\tilde{\phi}_\omega(\mathbf{x}) &= -\frac{\tilde{\varrho}(\mathbf{x})}{\varepsilon_0}, \quad k = \frac{\omega}{c}\end{aligned}$$

Das ist die inhomogene Helmholtz-Gleichung. Die Green-Funktion für die Helmholtz-Gleichung erfüllt

$$(\Delta + k^2)G(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = -\delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}')$$

und ist (mit Randbedingung $G \rightarrow 0$ für $|\mathbf{x} - \mathbf{x}'| \rightarrow \infty$) gegeben durch

$$\begin{aligned}G(\mathbf{x} - \mathbf{x}') &= \frac{1}{4\pi} \frac{e^{ik|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|}}{|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|} \\ &= ik \sum_{l=0}^{\infty} j_l(kr_{<}) h_l^{(1)}(kr_{>}) \sum_{m=-l}^m Y_{lm}^*(\vartheta', \phi') \underbrace{Y_{lm}(\vartheta, \phi)}_{\text{Basisfunktion}}\end{aligned}$$

Darin sind

$$j_l = (-x)^l \left(\frac{1}{x} \partial_x \right)^l \frac{\sin x}{x} \quad \text{sphärische Besselfunktionen} \quad (1.12)$$

$$h_l^{(1)} = j_l - (-x)^l \left(\frac{1}{x} \partial_x \right)^l \frac{\cos x}{x} \quad \text{sphärische Hankelfunktionen} \quad (1.13)$$

Die Lösung ist

$$\begin{aligned}\tilde{\phi}_\omega(\mathbf{x}) &= \int G(\mathbf{x}, \mathbf{x}') \frac{\tilde{\varrho}(\mathbf{x}')}{\varepsilon_0} \\ \Rightarrow \tilde{\phi}_\omega(\mathbf{x}) &= \frac{ik}{\varepsilon_0} \int \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l j_l(kr_{<}) h_l^{(1)}(kr_{>}) Y_{lm}(\vartheta, \varphi) dr' \\ &\quad \cdot \int Y_{lm}^*(\vartheta', \varphi') \tilde{\varrho}_\omega(r', \vartheta', \varphi') d\Omega'\end{aligned}$$

Von besonderem Interesse für praktische Anwendungen ist das Feld $\tilde{\phi}_\omega(\mathbf{x})$ an einem Ort \mathbf{x} außerhalb der Ladungsverteilung. Wählt man den Ursprung des Koordinatensystems im Schwerpunkt der Ladungsverteilung, so gilt dann $r = |\mathbf{x}| > |\mathbf{x}'| = r'$ und damit $r_< = r'$, $r_> = r$.

$$\begin{aligned} \Rightarrow \tilde{\phi}_\omega(\mathbf{x}) &= \frac{ik}{\varepsilon_0} \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l Y_{lm}(\vartheta, \varphi) h_l^{(1)}(kr) \\ &\quad \cdot \int j_l(kr') Y_{lm}^*(\vartheta', \varphi') \tilde{\varrho}_\omega(r', \vartheta', \varphi') d\Omega' dr' \end{aligned} \quad (1.14)$$

In vielen wichtigen Anwendungen ist die Ausdehnung der Ladungsverteilung klein gegenüber der Wellenlänge $\lambda = \frac{2\pi}{k} = \frac{2\pi c}{\omega}$ (z. B. Atome oder Moleküle: $r' = 1 \text{ \AA}$, $\lambda = 1 \text{ }\mu\text{m}$). Das Argument kr' von j_l ist also klein. Für $x \ll 1$ gilt

$$\begin{aligned} j_l(x) &\approx \frac{x^l}{(2l+1)!!} \\ \Rightarrow \int j_l(kr') Y_{lm}^* \tilde{\varrho}_\omega d\Omega' dr' &\approx \frac{k^l}{(2l+1)!!} \int r'^l Y_{lm}^* \tilde{\varrho}_\omega d\Omega' dr' \end{aligned} \quad (1.15)$$

Man definiert das sphärische Multipolmoment der Ordnung lm als

$$Q_{lm} := \int r'^l Y_{lm}^* \tilde{\varrho}_\omega d\Omega' dr' \quad (1.16)$$

Spezialfälle:

$$\begin{aligned} Q_{00} &= \frac{1}{\sqrt{4\pi}} \int \tilde{\varrho}_\omega(\mathbf{x}') d^3x' \\ &= \frac{Q}{\sqrt{4\pi}} \quad Q = \text{Gesamtladung des Ions/Moleküls bei } \omega \\ Q_{11} &= -\sqrt{\frac{3}{8\pi}} \int \tilde{\varrho}_\omega(\mathbf{x}') (x' - iy') d^3x' = -\sqrt{\frac{3}{8\pi}} (p_x - ip_y) \\ Q_{10} &= \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \int \tilde{\varrho}_\omega(\mathbf{x}') z' d^3x = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} p_z \end{aligned}$$

Darin ist $\mathbf{p} = (p_x, p_y, p_z)$ das (cartesische) elektrische Dipolmoment:

$$\mathbf{p} = \int \mathbf{x}' \varrho(\mathbf{x}') d^3x'$$

Das Potential, das durch einen reinen Punktdipol erzeugt wird, ist

$$\phi_{\text{Dip}}(\mathbf{x}) = \frac{\mathbf{p} \cdot \mathbf{x}}{4\pi\varepsilon_0 |\mathbf{x}|^3}$$

Anschauliche Bedeutung eines reinen Dipols: Zwei gegensätzliche Ladungen mit sehr kleinem Abstand L .

$$\text{Dipolmoment} = q(L) \cdot L \mathbf{n} = \mathbf{p}$$

L geht gegen 0, aber gleichzeitig geht $q(L) \rightarrow \infty$, so dass $q(L) \cdot L$ endlich bleibt.

Das elektrische Feld eines Dipols, der sich im Ursprung befindet, ist gegeben durch

$$\mathbf{E}_{\text{Dip}}(\mathbf{x}) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{3\hat{\mathbf{x}}(\mathbf{p}\hat{\mathbf{x}}) - \mathbf{p}}{|\mathbf{x}|^3} \quad \text{mit } \hat{\mathbf{x}} = \frac{\mathbf{x}}{|\mathbf{x}|}$$

Die allgemeine Entwicklung des Potentials in der Elektrostatik lautet:

$$\phi(\mathbf{x}) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \left[\frac{Q}{r} + \frac{\mathbf{p}\mathbf{x}}{r^3} + \frac{1}{2} \sum_{ij} \bar{Q}_{ij} \frac{x_i x_j}{r^5} + \dots \right]$$

Darin ist

$$\bar{Q}_{ij} = \int \varrho(\mathbf{x}) (3x_i x_j - \delta_{ij} \mathbf{x}^2) d^3x$$

der (spurlose) Tensor des Quadrupolmoments.

Gleichung (1.14) kann aber auch direkt durch Entwicklung nach Kugelflächenfunktionen hergeleitet werden. Diese sind Eigenfunktionen des Drehimpulsoperators und erfüllen die Orthogonalitätsrelation

$$\int_0^{2\pi} \int_0^\pi Y_{l'm'}^*(\vartheta, \varphi) Y_{lm}(\vartheta, \varphi) \sin \vartheta d\vartheta d\varphi = \delta_{ll'} \delta_{mm'} \quad (1.17)$$

und die Vollständigkeitsrelation

$$\sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l Y_{lm}^*(\vartheta', \varphi') Y_{lm}(\vartheta, \varphi) = \underbrace{\delta(\varphi - \varphi') \delta(\cos \vartheta - \cos \vartheta')}_{=\delta(\Omega - \Omega')} \quad (1.18)$$

Wegen Gleichung (1.18) gilt für eine beliebige skalare Funktion $f(\vartheta, \varphi)$:

$$\begin{aligned} f(\vartheta, \varphi) &= \int f(\vartheta', \varphi') \delta(\Omega - \Omega') d\Omega' \\ &= \sum_{l,m} \int Y_{lm}^*(\Omega') Y_{lm}(\Omega) f(\Omega') d\Omega' \\ &= \sum_{l,m} Y_{lm}(\vartheta, \varphi) \cdot F_{lm} \quad \text{mit den Koeffizienten } F_{lm} := \int Y_{lm}^*(\Omega') f(\Omega') d\Omega' \end{aligned}$$

In unserem Fall gilt:

$$\begin{aligned} \tilde{\phi}_\omega(\mathbf{x}) &= \sum_{l,m} Y_{lm}(\vartheta, \varphi) \tilde{\phi}_{\omega,lm}(\mathbf{r}) \\ \text{mit } \tilde{\phi}_{\omega,lm}(\mathbf{r}) &= \int Y_{lm}^*(\Omega') \tilde{\phi}_\omega(r', \vartheta', \varphi') d\Omega' \end{aligned}$$

Dies setzt man nun in die Helmholtz-Gleichung ein:

$$(\Delta + k^2)\tilde{\phi}_\omega(\mathbf{x}) = -\frac{1}{\varepsilon_0}\tilde{\varrho}_\omega(\mathbf{x})$$

Laplace-Operator in Kugelkoordinaten:

$$\begin{aligned}\Delta &= \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} r^2 \frac{\partial}{\partial r} - \frac{1}{r^2} \mathbf{L}^2 \quad ; \quad \mathbf{L} = \mathbf{x} \times (-i\nabla) \\ \mathbf{L}^2 Y_{lm} &= l(l+1) Y_{lm} \\ \Rightarrow \left(\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} r^2 \frac{\partial}{\partial r} - \frac{l(l+1)}{r^2} + k^2 \right) \tilde{\phi}_{\omega,lm}(\mathbf{r}) &= -\frac{1}{\varepsilon_0} \tilde{\varrho}_{\omega,lm}(\mathbf{r})\end{aligned}$$

Lösen dieser radialen Differentialgleichung mit geeigneten Randbedingungen (auslaufende Welle für $r \rightarrow \infty$, d. h. $\sim \cos(kr) \frac{1}{r} \sin(kr) \frac{1}{r}$) führt zu obigem Ausdruck (1.14) für $\tilde{\phi}_\omega(\mathbf{x})$.

Multipolentwicklung für Vektorfelder

Man kann auch eine Multipolentwicklung *divergenzfreier* Vektorfelder (z. B. $\text{div } \mathbf{B} = 0$) durchführen. Im Wesentlichen werden dabei die Kugelflächenfunktionen Y_{lm} ersetzt durch

$$\mathbf{X}_{lm} := \frac{1}{\sqrt{l(l+1)}} \mathbf{L} Y_{lm}(\vartheta, \varphi) \quad \text{„Vector spherical harmonics“}$$

\mathbf{X}_{lm} erfüllt

$$\begin{aligned}\int \mathbf{X}_{lm}^* \mathbf{X}_{l'm'} d\Omega &= \delta_{ll'} \delta_{mm'} \\ \int \mathbf{X}_{lm}^* \cdot (\mathbf{x} \times \mathbf{X}_{lm}) d\Omega &= 0\end{aligned}$$

Ein vollständiges System von Vektorfunktionen für divergenzfreie Felder ist dann gegeben durch

$$F_l(kr) \mathbf{X}_{lm} \quad \text{und} \quad \nabla \times (g_l(kr) \mathbf{X}_{lm})$$

$$\begin{aligned}\text{wobei} \quad F_l(kr) &= F_l^{(1)} h_l^{(1)}(kr) + F_l^{(2)} h_l^{(2)}(kr) \\ g_l(kr) &= g_l^{(1)} h_l^{(1)}(kr) + g_l^{(2)} h_l^{(2)}(kr) \\ h_l^{(i)}(kr) &= \text{sphärische Hankelfunktionen} \quad h_l^{(2)}(kr) = h_l^{(1)*}(kr)\end{aligned}$$

Die elektromagnetischen Felder im freien Raum lassen sich dann entwickeln gemäß

$$\begin{aligned}\mathbf{B} &= \sum_{l,m} [a_E(l, m) F_l(kr) \mathbf{X}_{lm} + a_m(l, m) \nabla \times g_l(kr) \mathbf{X}_{lm}] \\ \mathbf{E} &= \sum_{l,m} \left[\frac{i}{k} a_E(l, m) \nabla \times F_l(kr) \mathbf{X}_{lm} + a_m(l, m) g_l(kr) \mathbf{X}_{lm} \right]\end{aligned}$$

Felder, die proportional zu a_m sind heißen *sphärische TM-Felder* („transverse magnetic“) und Felder, die proportional zu a_E sind heißen *sphärische TE-Felder* („transverse electrical“).

Die Felder lassen sich auf die jeweiligen Multipolmomente zurückführen, wenn $kr \ll 1$ innerhalb der Ladungsverteilung gilt. Es gilt dann

$$a_E(l, m) \sim Q_{lm} \quad ; \quad a_m(l, m) \sim M_{lm}$$

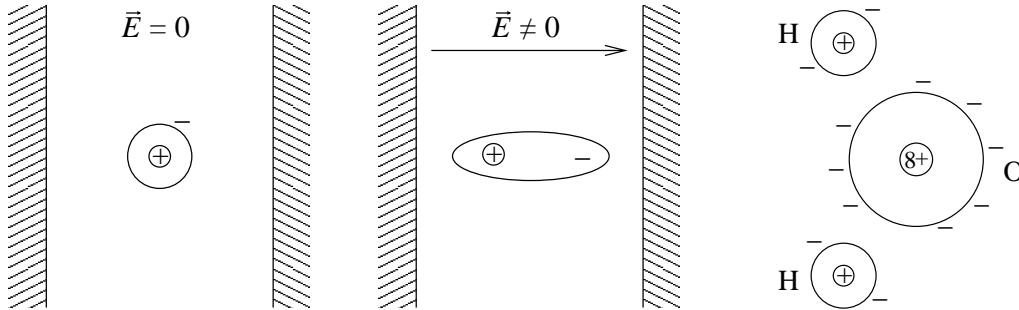
$$M_{lm} = -\frac{1}{(l+1)} \int r^l Y_{lm} \nabla \left(\frac{\mathbf{x} + \mathbf{j}(\mathbf{x})}{c} \right) d^3x$$

M_{lm} heißt magnetisches Multipolmoment. Genauer zur vektoriellen Multipolentwicklung findet man in [1], insbesondere Kapitel 16.2 und 16.6.

1.5 Elektrodynamik in dielektrischen Medien

Bis jetzt wurden nur Felder im Vakuum in Anwesenheit vorgegebener Ladungen behandelt. Oft möchte man aber elektromagnetische Felder im Inneren von Medien (z. B. Glas oder Kristallen) betrachten.

Fast alle Medien sind aus Atomen und Molekülen aufgebaut. In solchen Objekten sind die Ladungen gebunden, d. h. sie können durch ein angelegtes äußeres Feld nicht frei verschoben werden. Sie sind jedoch polarisierbar oder haben gar ein permanentes Dipolmoment. Atome sind z. B. durch Anlegen eines elektrischen Feldes polarisierbar:



Moleküle (z. B. Wasser) können auch ein permanentes Dipolmoment haben. Dies tritt oft bei ionischen Bindungen auf. Betrachtet man nicht den Effekt jedes einzelnen Moleküls, sondern nur makroskopische Felder, die über einen Raumbereich, der viele Moleküle enthält, gemittelt sind, kann man die makroskopischen Felder \mathbf{E} , \mathbf{D} , \mathbf{B} und \mathbf{H} durch folgende Gleichungen gut beschreiben:

$$\begin{aligned} \operatorname{div} \mathbf{D} &= \varrho & \operatorname{div} \mathbf{B} &= 0 \\ \operatorname{rot} \mathbf{E} &= -\dot{\mathbf{B}} & \operatorname{rot} \mathbf{H} &= \mathbf{j} + \dot{\mathbf{D}} \end{aligned} \quad (1.19)$$

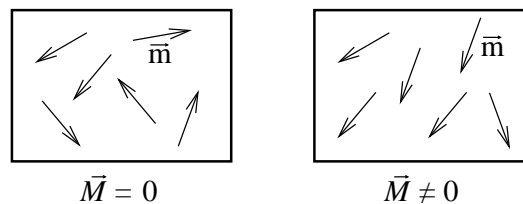
makroskopische Maxwell-Gleichungen

Es gelten die materialabhängigen Beziehungen

$$\mathbf{D} = \varepsilon_0 \mathbf{E} + \mathbf{P} \quad ; \quad \mathbf{B} = \mu_0 (\mathbf{H} + \mathbf{M})$$

Darin sind \mathbf{D} die dielektrische Verschiebungsdichte und \mathbf{H} die magnetische Feldstärke, \mathbf{P} ist die Polarisierung und \mathbf{M} die Magnetisierung des Mediums. Es gibt einige Spezialfälle:

- Im Vakuum gilt $\mathbf{P} = 0$ und $\mathbf{M} = 0$, so dass wir auf die bisherige Form der Maxwell-Gleichungen kommen.
- Wenn die Moleküle ein permanentes Dipolmoment (el. oder magn.) haben, aber im Medium ungeordnet sind, gilt trotzdem im Mittel $\mathbf{M} = \mathbf{P} = 0$. Werden die Moleküle ausgerichtet, so kann \mathbf{M} oder $\mathbf{P} \neq 0$ werden. Ein Beispiel für ein theoretisches Modell dazu ist das Ising-Modell.



- Sind die Atome/Moleküle polarisierbar, so gilt

$$\mathbf{P} = \chi \mathbf{E} \quad ; \quad \mathbf{D} = \varepsilon \mathbf{E} = \varepsilon_0 \varepsilon_r \mathbf{E} = (\varepsilon + \chi) \mathbf{E}$$

ε ist die Dielektrizitätskonstante des Mediums und χ seine Suszeptibilität. Dieser Effekt kann (vor allem bei Kristallen) richtungsabhängig sein (Doppelbrechung):

$$P_i = \chi_{ij} E_j \quad ; \quad D_i = \varepsilon_{ij} E_j$$

ε_{ij} : dielektrischer Tensor

- Für optisch aktive Medien gilt nach dem Modell von Fedorow²

$$\mathbf{M} = 0 \quad ; \quad \mathbf{D} = \varepsilon(\mathbf{E} + \beta \operatorname{rot} \mathbf{E})$$

Optische Aktivität heißt, dass die Polarisierung eines Lichtstrahls beim Durchgang durch das Medium gedreht wird.

- In nichtlinearen Medien gilt z. B.:

$$\mathbf{D} = \varepsilon_0 \mathbf{E} + \kappa |\mathbf{E}|^2 \mathbf{E}$$

²Es gibt verschiedene Modelle zur Beschreibung der optischen Aktivität. Dieses Modell sei nur als Beispiel herausgegriffen.

1.6 Herleitung der makroskopischen Maxwell-Gleichungen

Der physikalische Hintergrund der Größen \mathbf{E} , \mathbf{D} , \mathbf{B} und \mathbf{H} ist, dass sie makroskopische Felder darstellen, die als Mittelung über die „mikroskopischen“ Felder \mathbf{E}_{mik} und \mathbf{B}_{mik} auftreten. Letztere erfüllen die bisher behandelten Gleichungen

$$\begin{aligned} \operatorname{div} \mathbf{E}_{\text{mik}} &= \frac{\varrho_{\text{mik}}}{\varepsilon_0} & \operatorname{div} \mathbf{B}_{\text{mik}} &= 0 \\ \operatorname{rot} \mathbf{E}_{\text{mik}} &= -\dot{\mathbf{B}}_{\text{mik}} & \operatorname{rot} \mathbf{B}_{\text{mik}} &= \mu_0 (\mathbf{j}_{\text{mik}} + \varepsilon_0 \dot{\mathbf{E}}_{\text{mik}}) \end{aligned}$$

Wir spalten Ladungs- und Stromdichte wie folgt auf:

$$\begin{aligned} \varrho_{\text{mik}} &= \varrho_{\text{frei}} + \varrho_{\text{gebunden}} \\ \mathbf{j}_{\text{mik}} &= \mathbf{j}_{\text{frei}} + \mathbf{j}_{\text{gebunden}} \end{aligned}$$

Die freien Größen entsprechen dabei Teilchen, die nicht an Atome/Moleküle gebunden sind. Im Rahmen der klassischen Physik können sie geschrieben werden als

$$\begin{aligned} \varrho_{\text{frei}}(\mathbf{x}) &= \sum_i q_i \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}_i) \\ \mathbf{j}_{\text{frei}}(\mathbf{x}) &= \sum_i q_i \dot{\mathbf{x}}_i \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}_i) \quad \text{Summen über die freien Teilchen.} \end{aligned}$$

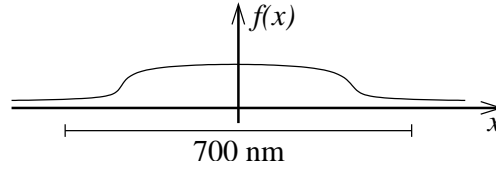
Die gebundenen Größen korrespondieren zu den Atomen/Molekülen des Mediums:

$$\begin{aligned} \varrho_{\text{gebunden}}(\mathbf{x}) &= \sum_n \varrho_n(\mathbf{x}) \quad \text{Summe über die Moleküle} \\ \varrho_n(\mathbf{x}) &= \sum_i q_i \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}_i) \quad \text{Summe über die Teilchen } (e^-, \text{ Kerne}) \text{ im Molekül} \\ \mathbf{j}_{\text{gebunden}}(\mathbf{x}) &= \sum_n \mathbf{j}_n(\mathbf{x}) \quad ; \quad \mathbf{j}_n(\mathbf{x}) = \sum_i q_i \dot{\mathbf{x}}_i \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}_i) \end{aligned}$$

In den meisten Situationen können die Meßgeräte für elektromagnetische Felder einzelne Moleküle (Größe $\sim 1 \text{ \AA}$) nicht auflösen. Bei optischen Experimenten ist die räumliche Auflösung beispielsweise in der Größenordnung der Wellenlänge ($\sim 6000 \text{ \AA}$). Man kann daher eine räumliche Mittelung über \mathbf{E}_{mik} und \mathbf{B}_{mik} durchführen ohne die Beschreibung der Experimente zu verschlechtern:

$$\begin{aligned} \mathbf{E}(\mathbf{x}) &= \langle \mathbf{E}_{\text{mik}}(\mathbf{x}) \rangle = \int f(\mathbf{x}') \mathbf{E}_{\text{mik}}(\mathbf{x} - \mathbf{x}') d^3x' \\ \mathbf{B}(\mathbf{x}) &= \langle \mathbf{B}_{\text{mik}}(\mathbf{x}) \rangle \end{aligned}$$

Darin soll $f(\mathbf{x})$ eine Funktion sein, die sich auf molekularer Skala langsam ändert, aber deren Träger klein gegenüber der Wellenlänge ist. Wegen der Mittelung soll natürlich gelten $\int f(\mathbf{x}) d^3x = 1$.



Für \mathbf{E} und \mathbf{B} folgen dann die Gleichungen

$$\begin{aligned}
 \operatorname{div} \mathbf{B}(\mathbf{x}) &= \frac{\partial}{\partial x_i} B_i(\mathbf{x}) \\
 &= \frac{\partial}{\partial x_i} \int f(\mathbf{x}') B_{\text{mik},i}(\mathbf{x} - \mathbf{x}') d^3x' \\
 &= \int f(\mathbf{x}') \frac{\partial}{\partial x_i} B_{\text{mik},i}(\mathbf{x} - \mathbf{x}') d^3x' \\
 &= \int f(\mathbf{x}') \underbrace{\operatorname{div} \mathbf{B}_{\text{mik}}(\mathbf{x} - \mathbf{x}')}_{=0} d^3x' \\
 &= \langle \operatorname{div} \mathbf{B}_{\text{mik}}(\mathbf{x}) \rangle = 0
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 \text{und analog} \quad \operatorname{div} \mathbf{E}(\mathbf{x}) &= \frac{\langle \varrho_{\text{mik}} \rangle}{\varepsilon_0} \\
 \operatorname{rot} \mathbf{E}(\mathbf{x}) &= -\dot{\mathbf{B}}(\mathbf{x}) \\
 \operatorname{rot} \mathbf{B}(\mathbf{x}) &= \mu_0 \langle \mathbf{j}_{\text{mik}}(\mathbf{x}) \rangle + \frac{1}{c^2} \dot{\mathbf{E}}(\mathbf{x})
 \end{aligned}$$

Die Mittelwerte können wie folgt verarbeitet werden:

$$\begin{aligned}
 \langle \varrho_{\text{mik}} \rangle &= \langle \varrho_{\text{frei}} \rangle + \langle \varrho_{\text{gebunden}} \rangle \\
 &=: \varrho(\mathbf{x}) + \langle \varrho_{\text{gebunden}} \rangle \quad \varrho(\mathbf{x}) : \text{makroskopische Ladungsdichte} \\
 \langle \varrho_{\text{gebunden}} \rangle &= \sum_{n(\text{Moleküle})} \langle \varrho_n(\mathbf{x}) \rangle
 \end{aligned} \tag{1.20}$$

Für jedes Molekül ist die Ausdehnung sehr viel kleiner als der Mittelungsbereich, daher:

$$\begin{aligned}
 \varrho_n(\mathbf{x}) &\approx \int f(\mathbf{x}') \varrho_n(\mathbf{x} - \mathbf{x}') d^3x' \\
 &= \int f(\mathbf{x}') \sum_{i(e^-, \text{ Kerne})} q_i \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}' - \mathbf{x}_i) d^3x' \\
 &= \sum_{i(e^-, \text{ Kerne})} q_i f(\mathbf{x} - \mathbf{x}_i)
 \end{aligned}$$

Ist \mathbf{x}_n der Schwerpunkt des Moleküls, so gilt $|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_n| \ll$ Träger von f und man kann f ent-

wickeln:

$$\begin{aligned}
 f(\mathbf{x} - \mathbf{x}_i) &= f(\mathbf{x} - \mathbf{x}_n - (\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_n)) \\
 &\approx f(\mathbf{x} - \mathbf{x}_n) - (\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_n) \nabla f(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_n) + \dots \\
 \Rightarrow \langle \varrho_n(\mathbf{x}) \rangle &\approx \sum_{i(e^-, \text{ Kerne})} q_i \{ f(\mathbf{x} - \mathbf{x}_n) - (\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_n) \nabla f(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_n) + \dots \} \\
 \Rightarrow \langle \varrho_n(\mathbf{x}) \rangle &\approx f(\mathbf{x} - \mathbf{x}_n) \underbrace{\sum_{i(e^-, \text{ Kerne})} q_i}_{q_n} - \nabla f(\mathbf{x} - \mathbf{x}_n) \underbrace{\sum_{i(e^-, \text{ Kerne})} q_i (\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_n)}_{\mathbf{p}_n} + \dots
 \end{aligned}$$

q_n ist die Ladung des Moleküls n . Für nicht ionisierte Moleküle ist $q_n = 0$. \mathbf{p}_n ist sein Dipolmoment.

$$\begin{aligned}
 \Rightarrow \langle \varrho_{\text{gebunden}} \rangle &= \sum_{n(\text{Moleküle})} (-\nabla f(\mathbf{x} - \mathbf{x}_n) \mathbf{p}_n) \\
 \text{Polarisation } \mathbf{P}(\mathbf{x}) &= \sum_n f(\mathbf{x} - \mathbf{x}_n) \mathbf{p}_n \quad ; \quad q_n = 0 \\
 \Rightarrow \boxed{\langle \varrho_{\text{gebunden}}(\mathbf{x}) \rangle} &= -\text{div } \mathbf{P}(\mathbf{x})
 \end{aligned}$$

Setzt man dies und Gleichung (1.20) in die mikroskopischen Maxwell-Gleichungen ein, so erhält man

$$\begin{aligned}
 \text{div } \mathbf{E} &= \frac{1}{\varepsilon_0} \langle \varrho_{\text{mik}} \rangle \\
 &= \frac{1}{\varepsilon_0} \varrho - \frac{1}{\varepsilon_0} \text{div } \mathbf{P} \\
 \mathbf{D} = \varepsilon_0 \mathbf{E} + \mathbf{P} &\Rightarrow \text{div } \mathbf{D} = \varrho
 \end{aligned}$$

Eine entsprechende Behandlung für

$$\text{rot } \mathbf{B} = \mu_0 \langle \mathbf{j}_{\text{mik}} \rangle + \frac{1}{c^2} \dot{\mathbf{E}}$$

führt auf

$$\begin{aligned}
 \langle \mathbf{j}_{\text{mik}} \rangle &= \mathbf{j} + \text{rot } \mathbf{M} + \dot{\mathbf{P}} \\
 \mathbf{M} &= \left\langle \sum_n \mathbf{m}_n \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}_n) \right\rangle \\
 \mathbf{m}_n &= \sum_{i(e^-, \text{ Kerne})} \frac{q_i}{2m_i} (\mathbf{x}_i \times m_i \dot{\mathbf{x}}_i) = \sum_{i(e^-, \text{ Kerne})} \frac{q_i}{2m_i} \mathbf{L}_i
 \end{aligned}$$

Hier ist \mathbf{m}_n das magnetische Dipolmoment des Moleküls n . (Zu Details vgl. [1], Abschnitt 6.7). Daraus folgen dann die makroskopischen Maxwell-Gleichungen Gleichung (1.19).

1.7 Ebene Wellen

Im Vakuum ($\rho = j = 0$) gilt:

$$\square \mathbf{E} = \square \mathbf{B} = 0 \quad ; \quad \operatorname{div} \mathbf{E} = \operatorname{div} \mathbf{B} = 0$$

Ansatz zur Lösung:

$$\begin{aligned} \mathbf{E} &= \mathcal{E}_{\mathbf{k}} \boldsymbol{\epsilon}_{\mathbf{k}} \exp(i\mathbf{k}\mathbf{x} - i\omega t) \\ \square \mathbf{E} &= \mathcal{E}_{\mathbf{k}} \boldsymbol{\epsilon}_{\mathbf{k}} \left(\frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} - \Delta \right) \exp(i\mathbf{k}\mathbf{x} - i\omega t) \end{aligned}$$

Darin sind $\mathcal{E}_{\mathbf{k}} \in \mathbb{C}$ die Amplitude und $\boldsymbol{\epsilon}_{\mathbf{k}}$ der Polarisationsvektor.

$$\implies \square \mathbf{E} = \mathcal{E}_{\mathbf{k}} \boldsymbol{\epsilon}_{\mathbf{k}} \left(-\frac{\omega^2}{c^2} + \mathbf{k}^2 \right) \exp(i\mathbf{k}\mathbf{x} - i\omega t) \stackrel{!}{=} 0$$

Das ist eine Lösung von $\square \mathbf{E} = 0$ falls $\omega = c|\mathbf{k}|$. Hierbei ist $\omega_{\mathbf{k}} := c|\mathbf{k}|$ die Frequenz eines Photons³ mit Impuls $\hbar\mathbf{k}$. Die Energie des Photons ist gegeben durch die Plancksche Formel $E = \hbar\omega_{\mathbf{k}}$. Der Polarisationsvektor $\boldsymbol{\epsilon}_{\mathbf{k}}$ wird festgelegt durch die Bedingung $\operatorname{div} \mathbf{E} = \partial_i E_i = 0$:

$$\begin{aligned} \operatorname{div} \mathbf{E} &= \mathcal{E}_{\mathbf{k}} (\boldsymbol{\epsilon}_{\mathbf{k}})_i i k_i \exp(i\mathbf{k}\mathbf{x} - i\omega_{\mathbf{k}} t) \\ &= i \mathcal{E}_{\mathbf{k}} (\boldsymbol{\epsilon}_{\mathbf{k}} \mathbf{k}) \exp(i\mathbf{k}\mathbf{x} - i\omega_{\mathbf{k}} t) \\ &\stackrel{!}{=} 0 \end{aligned}$$

$\implies \boldsymbol{\epsilon}_{\mathbf{k}}$ muss senkrecht auf dem Wellenvektor \mathbf{k} stehen!

Im \mathbb{R}^3 gibt es zwei linear unabhängige Vektoren senkrecht zu $\mathbf{k} \implies$ es gibt zwei unabhängige Polarisationsrichtungen. Die genauen Richtungen der $\boldsymbol{\epsilon}_{\mathbf{k}}^{(\sigma)}$ sind willkürlich. Eine Möglichkeit ist

$$\mathbf{k} = k \begin{pmatrix} \cos \varphi \sin \vartheta \\ \sin \varphi \sin \vartheta \\ \cos \vartheta \end{pmatrix} \quad ; \quad \boldsymbol{\epsilon}_{\mathbf{k}}^{(1)} = \begin{pmatrix} \cos \varphi \cos \vartheta \\ \sin \varphi \cos \vartheta \\ -\sin \vartheta \end{pmatrix} \quad ; \quad \boldsymbol{\epsilon}_{\mathbf{k}}^{(2)} = \frac{\mathbf{k}}{k} \times \boldsymbol{\epsilon}_{\mathbf{k}}^{(1)} = \begin{pmatrix} -\sin \varphi \\ \cos \varphi \\ 0 \end{pmatrix}$$

Die reellen Vektoren $\boldsymbol{\epsilon}_{\mathbf{k}}^{(1)}$ und $\boldsymbol{\epsilon}_{\mathbf{k}}^{(2)}$ entsprechen linear polarisiertem Licht. Der allgemeine Polarisationsvektor ist eine Superposition beider Vektoren:

$$\boldsymbol{\epsilon}_{\mathbf{k}} = \alpha \boldsymbol{\epsilon}_{\mathbf{k}}^{(1)} + \beta \boldsymbol{\epsilon}_{\mathbf{k}}^{(2)} \quad ; \quad \text{mit } |\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1 \quad , \quad \alpha, \beta \in \mathbb{C}$$

Ein Beispiel ist zirkular polarisiertes Licht:

$$\boldsymbol{\epsilon}_{\mathbf{k}}^{(\pm)} = \frac{1}{\sqrt{2}} (\boldsymbol{\epsilon}_{\mathbf{k}}^{(1)} \pm i \boldsymbol{\epsilon}_{\mathbf{k}}^{(2)})$$

³Der Begriff des Photons als elementares Quantum des Strahlungsfeldes wird eigentlich erst in der Quantenelektrodynamik eingeführt. Die Eigenschaften eines Photons hängen aber so eng mit denen der klassischen Elektrodynamischen Felder zusammen, dass es sich lohnt, den Begriff schon hier zu verwenden

In der Literatur werden bezüglich der Bezeichnungen unterschiedliche Konventionen verwendet. Wir halten uns hier an die von [1, 10]:

„+“: links zirkular oder positive Helizität, σ^+ -Licht

„-“: rechts zirkular oder negative Helizität, σ^- -Licht

σ^+ - und σ^- -Licht ist wichtig für die Auswahlregeln in der Atomphysik: $\sigma^\pm : \Delta m = \pm 1$, wobei m die magnetische Quantenzahl der Atome ist. Allgemeine Superpositionen $\epsilon_{\mathbf{k}} = \alpha \epsilon_{\mathbf{k}}^{(1)} + \beta \epsilon_{\mathbf{k}}^{(2)}$ heißen elliptisch polarisiert.

In der Quantenelektrodynamik beschreibt der Polarisationsvektor gleichzeitig den Spin eines Photons. Photonen haben Gesamtspin 1. Sie haben aber nur die z -Spin-Werte $s_z = \pm 1$. Das entspricht σ^+ - und σ^- -Licht. Die Auswahlregel $\Delta m = \pm 1$ folgt dann aus der Erhaltung des Gesamtspins (Atom + Photon). Der Wert $s_z = 0$ ist wegen der verschwindenden Ruhemasse nicht realisiert (vgl. [8], Abschnitt 14.5). Im Allgemeinen gehört zu einem zeitabhängigen \mathbf{E} -Feld auch ein zeitabhängiges \mathbf{B} -Feld. Dieses kann man aus der Maxwell-Gleichung $\text{rot } \mathbf{E} = -\dot{\mathbf{B}}$ herleiten:

$$\begin{aligned} \dot{\mathbf{B}} &= -\text{rot} \{ \mathcal{E}_{\mathbf{k}} \epsilon_{\mathbf{k}} e^{(i\mathbf{k}\mathbf{x} - i\omega_{\mathbf{k}}t)} + \text{c.c.} \} \\ &= -\epsilon_{ijk} \partial_j (\epsilon_{\mathbf{k}})_l \mathcal{E}_{\mathbf{k}} e^{(i\mathbf{k}\mathbf{x} - i\omega_{\mathbf{k}}t)} + \text{c.c.} \\ &= -\epsilon_{ijk} (\epsilon_{\mathbf{k}})_l \mathcal{E}_{\mathbf{k}} l k_j e^{(i\mathbf{k}\mathbf{x} - i\omega_{\mathbf{k}}t)} + \text{c.c.} \\ &= -i \mathcal{E}_{\mathbf{k}} (\mathbf{k} \times \epsilon_{\mathbf{k}})_i e^{(i\mathbf{k}\mathbf{x} - i\omega_{\mathbf{k}}t)} + \text{c.c.} \end{aligned}$$

Zur Lösung dieser Differentialgleichung macht man den Ansatz $B_i \sim \exp(-i\omega_{\mathbf{k}}t)$. Daraus ergibt sich:

$$\begin{aligned} \mathbf{B} &= \frac{\mathcal{E}_{\mathbf{k}}}{\omega_{\mathbf{k}}} (\mathbf{k} \times \epsilon_{\mathbf{k}}) e^{(i\mathbf{k}\mathbf{x} - i\omega_{\mathbf{k}}t)} + \text{c.c.} \\ &= \frac{1}{\omega_{\mathbf{k}}} (\mathbf{k} \times \mathbf{E}) \end{aligned}$$

Die allgemeine Lösung im freien Raum ist eine Superposition ebener Wellen:

$$\begin{aligned} \mathbf{E}(\mathbf{x}, t) &= \int d^3k \sum_{\sigma=1,2} \mathcal{E}_{\mathbf{k}}^{(\sigma)} \epsilon_{\mathbf{k}}^{(\sigma)} \exp(i\mathbf{k}\mathbf{x} - i\omega t) + \text{c.c.} \\ \mathbf{B}(\mathbf{x}, t) &= \int d^3k \sum_{\sigma=1,2} \frac{\mathcal{E}_{\mathbf{k}}^{(\sigma)}}{\omega_{\mathbf{k}}} (\mathbf{k} \times \epsilon_{\mathbf{k}}^{(\sigma)}) \exp(i\mathbf{k}\mathbf{x} - i\omega t) + \text{c.c.} \end{aligned}$$

Besonders erwähnenswert sind noch folgende Spezialfälle:

1. Der Polarisationsvektor setzt sich aus einem Realteil ϵ und einem Imaginärteil ϵ'' zusammen:

$$\begin{aligned} \mathbf{E} &= \mathcal{E}_{\mathbf{k}} \epsilon_{\mathbf{k}} \exp(i\mathbf{k}\mathbf{x} - i\omega_{\mathbf{k}}t) + \text{c.c.} \\ &= \mathcal{E}_{\mathbf{k}} (\epsilon' + i\epsilon'') \exp(i\mathbf{k}\mathbf{x} - i\omega_{\mathbf{k}}t) + \text{c.c.} \end{aligned}$$

Dabei gelte $\epsilon'^2 + \epsilon''^2 = 1$, $\mathcal{E} \in \mathbb{R}$.

$$\implies \mathbf{E} = \mathcal{E}_{\mathbf{k}} \epsilon' 2 \cos(\mathbf{k}\mathbf{x} - i\omega_{\mathbf{k}}t) - \mathcal{E}_{\mathbf{k}} \epsilon'' 2 \sin(\mathbf{k}\mathbf{x} - i\omega_{\mathbf{k}}t)$$

Es handelt sich also um eine laufende Welle.

2. Man betrachtet die Überlagerung zweier sich gegenläufig ausbreitender Wellen mit $\mathcal{E}_{\mathbf{k}} = \mathcal{E}_{-\mathbf{k}}$ und $\epsilon_{\mathbf{k}} = \epsilon_{-\mathbf{k}}$:

$$\begin{aligned} \mathbf{E} &= \mathbf{E}_{\mathbf{k}} + \mathbf{E}_{-\mathbf{k}} \\ &= \mathcal{E}_{\mathbf{k}} \epsilon_{\mathbf{k}} \exp(i\mathbf{k}\mathbf{x} - i\omega_{\mathbf{k}}t) + \mathcal{E}_{-\mathbf{k}} \epsilon_{-\mathbf{k}} \exp(-i\mathbf{k}\mathbf{x} - i\omega_{\mathbf{k}}t) + \text{c.c.} \end{aligned}$$

$$\implies \mathbf{E} \sim \cos(\mathbf{k}\mathbf{x}) \cos(\omega_{\mathbf{k}}t)$$

Es handelt sich also um eine stehende Welle.

Kapitel 2

Quantenfeldtheorie des Lichts - QED

2.1 Vielteilchentheorie in der Quantenmechanik

Nimmt man 2 freie Teilchen, so ergibt sich der gemeinsame Hamilton-Operator zu

$$H = \frac{p_1^2}{2m} + \frac{p_2^2}{2m} \quad (2.1)$$

Die zugehörige 2-Teilchen-Wellenfunktion ist

$$\psi(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) = \phi_n(\mathbf{x}_1) \cdot \phi_m(\mathbf{x}_2) \quad (2.2)$$

In dieser Wellenfunktion sind die Teilchen unterscheidbar, der experimentelle Befund jedoch zeigt, dass identische Teilchen NICHT unterscheidbar sind. Dies ist gewährleistet, wenn $\psi(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2)$ dieselben Meßergebnisse wie $\psi(\mathbf{x}_2, \mathbf{x}_1)$ liefert. Man führt den Vertauschungsoperator \hat{E} ein.

$$\hat{E}\psi(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) = \psi(\mathbf{x}_2, \mathbf{x}_1) \quad (2.3)$$

Für den Austausch-Operator gilt $\hat{E}^2 = 1$. Somit sind die Eigenwerte dieses Operators ± 1 . Als Eigenfunktionen definiert man:

$$\hat{E}\psi_B(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) = +\psi_B(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) = \psi_B(\mathbf{x}_2, \mathbf{x}_1) \quad (2.4)$$

$$\hat{E}\psi_F(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) = -\psi_F(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) = \psi_F(\mathbf{x}_2, \mathbf{x}_1) \quad (2.5)$$

Aus dem experimentellen Befunden schliesst man, dass alle Teilchen in der Natur Eigenfunktionen des \hat{E} -Operators:

- $\psi_B \Leftrightarrow$ Bosonen
- $\psi_F \Leftrightarrow$ Fermionen

Das Pauli-Verbot ist eine Konsequenz der Antisymmetrie von ψ_F .

Spin-Statistik-Theorem

- Bosonen \Leftrightarrow ganzzahliger Spin
- Fermionen \Leftrightarrow halbzahlgiger Spin

Der Beweis benutzt im Wesentlichen Kausalität und kann in [4] gefunden werden.

Vielteilchen-Wellenfunktion $\psi(x_1, \dots, x_n)$ soll symmetrisch oder antisymmetrisch unter dem Austausch zweier beliebiger Teilchen sein:

$$\psi(x_1, \dots, x_i, \dots, x_j, \dots, x_n) = \pm \psi(x_1, \dots, x_j, \dots, x_i, \dots, x_n) \quad (2.6)$$

Das erreicht man durch Symmetrisierung: Summiere über alle Permutationen der Koordinaten und normiere

$$\psi_B(x_1, \dots, x_n) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_p \psi(x_{p(1)}, \dots, x_{p(n)}) \quad (2.7)$$

$$\psi_F(x_1, \dots, x_n) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_p (-1)^p \psi(x_{p(1)}, \dots, x_{p(n)}) \quad (2.8)$$

wobei p die Permutationen signalisiert, also $(-1)^p$ ist $+1$ für gerade Anzahl von Vertauschungen, -1 für ungerade Anzahl von Vertauschungen.

Als Beispiel wird die Produktwellenfunktion freier Teilchen benutzt:

$$\psi(x_1, x_2, x_3) = \psi_l(x_1) \psi_m(x_2) \psi_n(x_3) \quad (2.9)$$

Also Teilchen 1 im Zustand l , Teilchen 2 im Zustand m , Teilchen 3 in n . Somit wären die Teilchen unterscheidbar.

Für Fermionen wäre die ununterscheidbare Wellenfunktion per Konstruktion also:

$$\begin{aligned} \psi_{lmn}^F(x_1, x_2, x_3) = & \frac{1}{\sqrt{6}} \{ \psi_l(x_1) \psi_m(x_2) \psi_n(x_3) - \psi_l(x_2) \psi_m(x_1) \psi_n(x_3) \\ & + \psi_l(x_2) \psi_m(x_3) \psi_n(x_1) - \psi_l(x_3) \psi_m(x_2) \psi_n(x_1) \\ & + \psi_l(x_3) \psi_m(x_1) \psi_n(x_2) - \psi_l(x_1) \psi_m(x_3) \psi_n(x_2) \} \end{aligned}$$

Dies wäre für große Teilchenzahlen sehr aufwändig.

2.1.1 Fock-Raum und Teilchenzahldarstellung

In der Einteilchenquantenmechanik muss man nicht $\psi(x)$, also die Ortsdarstellung für die Wellenfunktion kennen. Um den Zustand vollständig festzulegen, reichen Quantenzahlen aus. Zum Beispiel sind das beim H-Atom die Quantenzahlen n, l und m . Der Zustand ist also vollständig durch $|n, l, m\rangle$ statt durch $\psi_{nlm}(x) = \langle x | n, l, m \rangle$ bestimmt.

In der Vielteilchentheorie reicht es analog völlig aus zu wissen, wie viele Teilchen in welchen Zuständen sind: der ket $|1_l, 1_m, 1_n\rangle$ wird mit dem Zustand 1 Teilchen in l, 1 Teilchen in m, und 1 Teilchen in n, also der Wellenfunktion $\psi_{lmn}^F(x_1, x_2, x_3)$ identifiziert.

Bosonisches Beispiel:

$$\begin{aligned}\psi_{llm}^B(x_1, x_2, x_3) &= \frac{1}{\sqrt{3}} \{ \psi_l(x_1)\psi_l(x_2)\psi_m(x_3) \\ &\quad + \psi_l(x_1)\psi_l(x_3)\psi_m(x_2) \\ &\quad + \psi_l(x_2)\psi_l(x_3)\psi_m(x_1) \} \\ &\Longleftrightarrow |2_l, 1_m\rangle\end{aligned}$$

Superposition solcher Zustände sind möglich und werden auch im Experiment präpariert, z.B:

$$|\psi\rangle = \alpha |2_l, 1_m\rangle + \beta |3_l, 0_m\rangle + \gamma |1_l, 2_m\rangle$$

Aber auch Superpositionen von Zuständen mit verschiedener Teilchenzahl wie

$$|\psi\rangle = \alpha |1_l\rangle + \beta |2_l\rangle + \gamma |3_l, 4_m\rangle \dots$$

sind möglich. Formal sind Superpositionen von Zuständen mit verschiedener Teilchenzahl Elemente des Fock-Raumes, der wie folgt definiert ist.

- Sei $\mathcal{H}^{(1)}$ der Hilbert-Raum für 1-Teilchen-Wellenfunktionen
- $\mathcal{H}^{(2)}$ der Hilbert-Raum für 2-Teilchen-Wellenfunktionen ...

Der Fockraum ist die direkte Summe aller N -Teilchen-Hilberträume:

$$F := \mathcal{H}^{(0)} \oplus \mathcal{H}^{(1)} \oplus \mathcal{H}^{(2)} \oplus \dots \oplus \mathcal{H}^{(N)} \quad (2.10)$$

$\mathcal{H}^{(0)}$ beschreibt das Vakuum und hat dementsprechend nur einen einzigen Zustand, der als $|0\rangle$ geschrieben wird. ($\langle 0|0\rangle = 1$).

Man braucht den Fockraum, um Prozesse zu beschreiben, die die Teilchenzahl einer Teilchensorte nicht erhalten. Zum Beispiel kann man die Paarerzeugung von e^+ und e^- aus einem γ -Quant folgendermaßen darstellen ¹

$$|1_\gamma\rangle \otimes |0_{e+}\rangle |0_{e-}\rangle \longrightarrow |0_\gamma\rangle \otimes |1_{e+}\rangle |1_{e-}\rangle$$

Als zweites Beispiel kann man die Anregung eines Atoms vom Grundzustand $|1_g\rangle$ in den angeregten Zustand $|1_e\rangle$ durch ein Photon so darstellen:

$$|1_g\rangle \otimes |1_\gamma\rangle \longrightarrow |1_e\rangle \otimes |0_\gamma\rangle$$

¹Eigentlich braucht man zur Energie und Impulserhaltung bei diesem Prozeß noch ein weiteres Teilchen, aber es geht uns hier nur um das Prinzip.

2.1.2 Erzeuger und Vernichter

Diese erlauben eine einfache Darstellung von Vielteilchen-Wellenfunktionen. Definiere den Erzeuger eines Teilchens im Zustand (in der Mode) l durch:

$$a_l^\dagger |n_l^{(l)}, n_m^{(m)} \dots\rangle = \sqrt{n_l^{(l)} + 1} |(n_l^{(l)} + 1)_l, n_m^{(m)} \dots\rangle \quad (2.11)$$

$$a_l |n_l^{(l)}, n_m^{(m)} \dots\rangle = \sqrt{n_l^{(l)}} |(n_l^{(l)} - 1)_l, n_m^{(m)} \dots\rangle \quad (2.12)$$

wobei beide Formeln für Bosonen definiert sind.

Für diese Operatoren gilt folgende Vertauschungsrelation. Zur Vereinfachung der Schreibweise lassen wir die Indizes weg.

$$\begin{aligned} [a^\dagger, a] |n\rangle &= a^\dagger a |n\rangle - a a^\dagger |n\rangle \\ &= a^\dagger \sqrt{n} |n-1\rangle - a \sqrt{n+1} |n+1\rangle \\ &= n |n\rangle - (n+1) |n\rangle \\ &= (-1) |n\rangle \end{aligned}$$

Daraus folgt $[a, a^\dagger] = 1$. Die Wirkung der Operatoren sowie die Vertauschungsrelation sind also dieselben wie beim harmonischen Oszillator. Allgemein gilt

$$[a_l, a_m^\dagger] = \delta_{lm} \quad (2.13)$$

$$[a_l, a_m] = [a_l^\dagger, a_m^\dagger] = 0 \quad (2.14)$$

Der physikalische Grund dieser Analogie zwischen harmonischem Oszillator und den Vielteilchenzuständen liegt darin, dass die Energieniveaus analog zu denen des harmonischen Oszillators gelegen sind: Die Erzeugung von n Teilchen der Energie E_0 entspricht einer Energiezunahme von nE_0 . Die ist analog zur n -fachen Anregung eines harmonischen Oszillators, bei der ebenfalls die Energie nE_0 (für $E_0 = \hbar\omega$) benötigt wird.

Offensichtlich gilt für Bosonen:

$$\begin{aligned} a_l^\dagger \mathcal{H}^{(N)} &\longrightarrow \mathcal{H}^{(N+1)} \\ a_l \mathcal{H}^{(N)} &\longrightarrow \mathcal{H}^{(N-1)} \\ a_l |0\rangle &= 0 = \text{Zahl!} \end{aligned}$$

Dabei sind die beiden oberen Gleichungen Abbildungen vom Fockraum in den Fockraum, die untere Abbildung ist die Definitionsgleichung für die Vernichtung des Vakuums.

Für Fermionen muss natürlich wegen des Pauli-Verbots $(a_l^\dagger)^2 = 0$ gelten. Diese Forderung lässt sich durch die Relationen

$$\{a_l^\dagger, a_m^\dagger\} = \{a_l, a_m\} = 0 \quad \{a_l, a_m^\dagger\} = \delta_{lm} \quad (2.15)$$

erfüllen, wobei $\{A, B\} = AB + BA$ den Antikommutator bezeichnet.

2.1.3 Der Feldoperator

Wie berechnet man nun Erwartungswerte mit Hilfe von Erzeugern und Vernichtern? Wir betrachten einen 1-Teilchen-Operator $\hat{O}(\hat{x}, \hat{p})$. Nun gilt in der Ein-Teilchen-Theorie

$$\langle \hat{O} \rangle = \int \psi^*(\hat{x}) \hat{O} \psi(x) d^3x$$

Für N Teilchen ergibt sich dann der Erwartungswert von \hat{O} offensichtlich zu:

$$\langle \hat{O} \rangle = \sum_{i=1}^N \langle \hat{O} \rangle_{\text{Einteilchen}}$$

Die legt nahe, den Erwartungswert eines Ein-Teilchen-Operators wie folgt zu definieren:

$$\begin{aligned} \langle \hat{O}_N \rangle &:= \sum_{i=1}^N \langle \hat{O}(\hat{x}_i, \hat{p}_i) \rangle \\ &= \sum_{i=1}^N \int d^3x_1 \dots d^3x_n \psi_N^*(x_1, \dots, x_N) \hat{O}_N \psi(x_1, \dots, x_n) \end{aligned} \quad (2.16)$$

Betrachten wir z.B. die Energie, mit der Eigenwertgleichung

$$H(\hat{x}, \hat{p}) \psi_a(x) = E_a \psi_a(x) \quad (2.17)$$

Bei einem n -Teilchenzustand $|n_a, \dots, n_{a'}, \dots, n_{a''}\rangle$ ist die Energie offensichtlich

$$\begin{aligned} E &= E_a n_a + \dots + E_{a'} n_{a'} + \dots \\ &= \int d^3x \psi_a^*(x) H(\hat{x}, \hat{p}) \psi_a(x) n_a + \int d^3x \psi_{a'}^*(x) H(\hat{x}, \hat{p}) \psi_{a'}(x) n_{a'} + \dots \end{aligned} \quad (2.18)$$

Die Teilchenzahlen kann man mit Hilfe der Erzeuger/Vernichter berechnen:

Führe folgenden Operator ein:

$$\boxed{\hat{N}_a = a_a^\dagger a_a} \quad (2.19)$$

Das ist der Anzahloperator für ein Teilchen im Zustand a . Die Deutung als Anzahloperator wird so motiviert:

$$\begin{aligned} \langle \dots, n_a, \dots | \hat{N}_a | \dots, n_a, \dots \rangle &= \langle \dots, n_a, \dots | a_a^\dagger a_a | \dots, n_a, \dots \rangle \\ &= \langle \dots, n_a, \dots | a_a^\dagger \sqrt{n_a} | \dots, (n_a - 1)_a, \dots \rangle \\ &= \langle \dots, n_a, \dots | \sqrt{(n_a - 1) + 1} \sqrt{n_a} | \dots, n_a, \dots \rangle = n_a \langle \dots | \dots \rangle = n_a \end{aligned} \quad (2.20)$$

Also gilt für E :

$$\begin{aligned} E &= \int d^3x \psi_a^*(x) H(\hat{x}, \hat{p}) \psi_a(x) \langle \dots, n_a, \dots, n_{a'} | a_a^\dagger a_a | \dots, n_a, \dots, n_{a'} \rangle \\ &+ \int d^3x \psi_{a'}^*(x) H(\hat{x}, \hat{p}) \psi_{a'}(x) \langle \dots, n_a, \dots, n_{a'} | a_{a'}^\dagger a_{a'} | \dots, n_a, \dots, n_{a'} \rangle \\ &+ \dots \end{aligned} \quad (2.21)$$

Wichtig:

In diesem Ausdruck wirken die Operatoren a_a , a_a^\dagger nur auf die Teilchenzahlzustände, nicht auf $\psi_a(x)$.

Umgekehrt wirkt $H(\hat{x}, \hat{p})$ nur auf $\psi_a(x)$, nicht auf $|\dots, n_a, \dots\rangle$.

Die Teilchenzahlzustände sind eine Art Buchhaltungstrick, um die Kombinatorik zu vereinfachen.

Wir können also den Ausdruck für E umschreiben in:

$$E = \langle \dots, n_a, n_{a'}, \dots | \int d^3x \psi_a^*(x) H(\hat{x}, \hat{p}) \psi_a(x) a_a^\dagger a_a | \dots, n_a, n_{a'}, \dots \rangle + \dots \quad (2.22)$$

Führe den *Feldoperator* $\Psi(x) := \sum_a a_a \psi_a(x)$ ein:

$$E = \langle \dots, n_a, n_{a'}, \dots | \int d^3x \Psi^\dagger(x) H(\hat{x}, \hat{p}) \Psi(x) | \dots, n_a, n_{a'}, \dots \rangle \quad (2.23)$$

Beweis der Wirkung des Feldoperators:

$$\begin{aligned} \langle \dots | \int d^3x \Psi^\dagger H \Psi | \dots \rangle &= \langle \dots | \int d^3x \sum_a \psi_a^*(x) a_a^\dagger H \sum_b \psi_b(x) a_b | \dots \rangle \\ &= \sum_{a,b} \underbrace{\int d^3x \psi_a^* H \psi_b}_{=E_b \int \psi_a^* \psi_b = E_b \delta_{ab}} \langle \dots | a_a^\dagger a_b | \dots \rangle = \sum_a E_a \langle \dots | a_a^\dagger a_a | \dots \rangle = \sum_a E_a n_a = E \end{aligned} \quad (2.24)$$

Allgemein kann man jeden Erwartungswert in einem Fock-Zustand $|\psi\rangle$ von einem Einteilchenoperator $\hat{O}(\hat{x}, \hat{p})$ herleiten gemäß:

$$\langle \hat{O}(\hat{x}, \hat{p}) \rangle = \langle \psi | \int d^3x \Psi^\dagger(x) \hat{O}(\hat{x}, \hat{p}) \Psi(x) | \psi \rangle \quad (2.25)$$

Dies gilt für beliebige Elemente des Fock-Raumes, z.B.

$$|\psi\rangle = |1_a\rangle + |2_{a'}\rangle \rightarrow \langle \psi | \Psi^\dagger \Psi | \psi \rangle = \langle 1_a | \Psi^\dagger \Psi | 1_a \rangle + \langle 2_{a'} | \Psi^\dagger \Psi | 2_{a'} \rangle \quad (2.26)$$

Bemerkungen zum Feldoperator:

- $\Psi(x)$ ist in gewisser Weise sowohl ein Operator als auch ein Zustand:

$$\Psi(x) = \sum_a a_a \psi_a(x) \quad (2.27)$$

a_a : Operator im Fock-Raum

$\psi_a(x)$: Einteilchenzustand

Man könnte $\psi_a(x)$ als $\langle x | \psi_a \rangle_{\text{Einteilchen}}$ deuten:

$$\rightarrow \Psi(x) = \langle x | \sum_a a_a | \psi_a \rangle_{\text{Eint.}} = \langle x | \Psi \rangle_{\text{Eint.}} \quad (2.28)$$

- Interpretation von $\Psi(x)$: Was ist der Zustand $\Psi^\dagger(x) |0\rangle$? Wie wir im Folgenden sehen werden, ist er ein spezieller Einteilchenzustand im Ein-Teilchen Hilbert-Raum $\mathcal{H}^{(1)}$. Betrachte dazu einen vollständig lokalisierten Zustand im $\mathcal{H}^{(1)}$:

$$\begin{aligned}\phi_{x_0}(x) &= \delta(x - x_0) = \sum_n c_n \phi_n(x), \quad \{\phi_n\} = \text{Basis des } \mathcal{H}^{(1)} \\ c_n &= \int d^3x \phi_n^*(x) \phi_{x_0}(x) = \int d^3x \phi_n^*(x) \delta(x - x_0) = \phi_n^*(x_0) \\ \rightarrow \phi_{x_0}(x) &= \sum_n \phi_n^*(x_0) \phi_n(x) \quad (\text{Vollständigkeitsrelation})\end{aligned}\tag{2.29}$$

Die Fock-Raum-Darstellung dieses Zustandes lautet

$$\sum_n \phi_n^*(x_0) |1_n\rangle = \sum_n \phi_n^*(x_0) a_n^\dagger |0\rangle = \Psi^\dagger(x_0) |0\rangle\tag{2.30}$$

Also: $\Psi^\dagger(x_0)$ *erzeugt* ein Teilchen am Ort x_0 .

$\Psi(x_0)$ *vernichtet* ein Teilchen am Ort x_0 .

- Kommutatorrelationen für Bosonen:

$$\begin{aligned}[\Psi(x), \Psi^\dagger(y)] &= \left[\sum_l a_l \psi_l(x), \sum_n a_n^\dagger \psi_n^*(y) \right] = \sum_{l,n} \psi_l(x) \psi_n^*(y) \underbrace{[a_l, a_n^\dagger]}_{\delta_{ln}} \\ &= \sum_n \psi_n(x) \psi_n^*(y) = \delta(x - y) \quad (\text{für Bosonen})\end{aligned}\tag{2.31}$$

$$\boxed{[\Psi(x), \Psi^\dagger(y)] = \delta(x - y)}\tag{2.32}$$

$$\boxed{[\Psi^\dagger(x), \Psi^\dagger(y)] = [\Psi(x), \Psi(y)] = 0}\tag{2.33}$$

Für Fermionen gilt analog:

$$\begin{aligned}\{a_l, a_m^\dagger\} &= \delta_{lm} = a_l a_m^\dagger + a_m a_l^\dagger \\ \rightarrow \{\Psi(x), \Psi^\dagger(y)\} &= \delta(x - y)\end{aligned}\tag{2.34}$$

$$\boxed{\{\Psi^\dagger(x), \Psi^\dagger(y)\} = \{\Psi(x), \Psi(y)\} = 0}\tag{2.35}$$

2.1.4 Zweite Quantisierung

Die Konstruktion der Feldoperatoren wie oben ist mathematisch äquivalent zur nochmaligen Quantisierung der Schrödinger-Wellenfunktion.

Kanonische Quantisierung eines klassischen Teilchens:

Mit der Lagrange-Funktion $L(x, \dot{x})$ läßt sich der kanonisch konjugierte Impuls definieren:

$$p = \frac{\partial L}{\partial \dot{x}} \quad (2.36)$$

Quantisiert wird, indem x und p zu Operatoren \hat{x} und \hat{p} gemacht werden und man folgende Kommutatorrelation fordert:

$$[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar \quad (2.37)$$

Genauso kann man bei einem Feld vorgehen:

Für ein Schrödinger-Teilchen entspricht der Lagrange-Funktion die Lagrange-Dichte ²

$$\mathcal{L}(\psi, \psi^*, \dot{\psi}, \dot{\psi}^*) = i\hbar(\psi^* \dot{\psi} - \dot{\psi}^* \psi) - \frac{\hbar^2}{2m} \nabla \psi^* \nabla \psi - \psi^* V \psi \quad (2.38)$$

Die Feldgleichung führt auf die komplex konjugierte Schrödinger-Gleichung:

$$\partial_t \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\psi}} = -\partial_i \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial (\partial_i \psi)} + \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \psi} \quad (2.39)$$

$$\rightarrow \partial_t i\hbar \psi^* = \partial_i^2 \frac{\hbar^2}{2m} \psi^* - V \psi^* \quad (2.40)$$

Man definiert die kanonisch konjugierte Impulsdichte

$$\pi(x) = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\psi}(x)} = i\hbar \psi^*(x) \quad (2.41)$$

und quantisiert nach dem folgenden Schema:

$$\begin{aligned} \psi(x), \pi(x) &\rightarrow \Psi(x), \Pi(x) \\ [\Psi(x), \Pi(y)] &= i\hbar \delta(x-y) \rightarrow [\Psi(x), \Psi^\dagger(y)] = \delta(x-y) \end{aligned} \quad (2.42)$$

Man erhält also dieselben Kommutatorrelationen wie bei der Konstruktion des Feldoperators mit Hilfe von Erzeugern und Vernichtern.

Die Methode der zweiten Quantisierung wird am häufigsten angewendet bei der Erstellung einer Vielteilchentheorie für Felder. Sie hat allerdings den Nachteil, dass die explizite Konstruktion des Fock-Raums und die Bedeutung der Feldoperatoren nicht so offensichtlich sind wie bei der vorher beschriebenen Methode.

2.1.5 Zusammenfassung der Konstruktion einer Vielteilchentheorie

“Kochrezept” zur Konstruktion einer Vielteilchentheorie am Beispiel des Schrödingerfeldes:

²Es gibt auch andere Formen für die Lagrange-Dichte eines Schrödinger-Teilchens. Die hier verwendete ist für unsere Zwecke geeignet.

- (i) Wähle stationäre Lösungen $\varphi_n(x)$ einer Einteilchentheorie mit $\langle \varphi_n | \varphi_m \rangle = \delta_{nm}$. Das Skalarprodukt soll zeitunabhängig sein, da sonst die Bedeutung der Moden und damit der Vernichter und des Feldoperators zeitabhängig wäre. Die Interpretation der Operatoren im Schrödinger-Bild wäre dann schwieriger.

$$\begin{aligned}
 i\hbar \partial_t \psi &= H\psi, \quad \langle \psi | \psi' \rangle = \int d^3x \psi^* \psi' \\
 \partial_t \langle \psi | \psi' \rangle &= \int d^3x \left(\dot{\psi}^* \psi' + \psi^* \dot{\psi}' \right) = \int d^3x \left\{ \frac{i}{\hbar} (H\psi^*) \psi' + \psi^* \frac{-i}{\hbar} H\psi' \right\} \\
 &= \frac{i}{\hbar} \int d^3x \{ \psi^* (H\psi') - \psi^* (H\psi') \} = 0
 \end{aligned} \tag{2.43}$$

Dabei wurden die hermitesch konjugierte Schrödingergleichung und die Hermitezität von H bezüglich des Skalarproduktes benutzt.

- (ii) Ersetze die allgemeine Lösung

$$\psi(x) = \sum_n c_n \varphi_n(x) \tag{2.44}$$

der Einteilchen-Bewegungsgleichungen durch den Feldoperator

$$\Psi(x) = \sum_n a_n \varphi_n(x) \quad \text{mit} \quad [a_n, a_m^\dagger] = \delta_{nm} \tag{2.45}$$

(bzw. $\{a_n, a_m^\dagger\} = \delta_{nm}$ für Fermionen).
 $\Psi^\dagger(x)$ erzeugt ein Teilchen am Ort x .

2.1.6 Quantisierung in Coulomb-Eichung

Die Lagrange-Dichte \mathcal{L} für das elektromagnetische Feld lautet

$$\mathcal{L} \propto \mathbf{E}^2 - c^2 \mathbf{B}^2 = (-\nabla\phi - \dot{\mathbf{A}})^2 - c^2 (\text{rot } \mathbf{A})^2 \tag{2.46}$$

\mathcal{L} enthält keine Ableitungen der Felder \mathbf{E} und \mathbf{B} und führt deshalb nur zu den Maxwell-Gleichungen, wenn man es als Funktion der Potentiale betrachtet. Die Feldgleichungen in Coulomb-Eichung ($\text{div } \mathbf{A} = 0$) lauten

$$\square \mathbf{A} = \mu_0 \mathbf{j} - \frac{1}{c^2} \nabla \dot{\phi}, \quad \Delta \phi = -\frac{\rho}{\epsilon_0} \tag{2.47}$$

Die Gleichung für ϕ ist nicht dynamisch!

Die entsprechenden Gleichungen im Vakuum lauten:

$$\square \mathbf{A} = -\frac{1}{c^2} \nabla \dot{\phi}, \quad \Delta \phi = 0 \quad (2.48)$$

Randbedingungen: $\phi \xrightarrow{r \rightarrow \infty} 0 \implies \phi = 0 \implies \square \mathbf{A} = 0$
 Lösung:

$$\mathbf{A}(\mathbf{x}, t) = \mathbf{A}^{(+)}(\mathbf{x}, t) + \mathbf{A}^{(-)}(\mathbf{x}, t) \quad (2.49)$$

$$= \underbrace{\int d^3k \sum_{\sigma=1,2} A_{k\sigma} \overbrace{\epsilon_{\sigma k} N_{\sigma k} \exp(-i\omega_k t) \exp(i\mathbf{k}\mathbf{x})}^{\text{Modenfunktion}}}_{\mathbf{A}^{(+)}(\mathbf{x}, t)} + \underbrace{\text{c.c.}}_{\mathbf{A}^{(-)}(\mathbf{x}, t)} \quad (2.50)$$

dabei sind:

- $A_{k\sigma}$ die Entwicklungskoeffizienten
- $\epsilon_{\sigma k}$ der Polarisationsvektor
- $N_{\sigma k}$ ein Normierungskoeffizient
- $\mathbf{A}^{(+)}(\mathbf{x}, t)$ der sog. „positive Frequenzanteil“ ($\propto \exp(-i\omega_k t)$)

Wir wissen, daß $e^{i\mathbf{k}\mathbf{x}}$ eine vollständige Basis ist (wegen der Fouriertransformation). Da $e^{i\mathbf{k}\mathbf{x}}$ schon in $\mathbf{A}^{(+)}(\mathbf{x}, t)$ alleine vorkommt, reicht es, nur $\mathbf{A}^{(+)}(\mathbf{x}, t)$ zu betrachten. Da außerdem $\mathbf{A}(\mathbf{x}, t)$ reell ist, kann der entsprechende Operator $\hat{\mathbf{A}}$ nur ein hermitescher Operator sein, aber $[a, a^\dagger] = 1$ bedeutet, daß a nicht hermitesch sein kann. Deshalb kann der volle Operator $\hat{\mathbf{A}}$ nicht alleine aus Vernichtern aufgebaut werden. Auch das ist ein Grund, $\mathbf{A}^{(+)}(\mathbf{x}, t)$ statt $\mathbf{A}(\mathbf{x}, t)$ zu quantisieren.

Seien nun $\mathbf{A}^{(+)}(\mathbf{x}, t)$, $\mathbf{A}'^{(+)}(\mathbf{x}, t)$ Lösungen von $\square \mathbf{A} = 0$. Ein erhaltendes Skalarprodukt ist dann gegeben durch

$$\left\langle \mathbf{A}^{(+)}(\mathbf{x}, t) \left| \mathbf{A}'^{(+)}(\mathbf{x}, t) \right. \right\rangle = -i \frac{\epsilon_0}{\hbar} \int d^3x \left\{ \underbrace{\dot{\mathbf{A}}^{(+)*}}_{\dot{\mathbf{A}}^{(-)}} \mathbf{A}'^{(+)} - \underbrace{\mathbf{A}^{(+)*}}_{\mathbf{A}^{(-)}} \dot{\mathbf{A}}'^{(+)} \right\}$$

Der Vorfaktor stammt aus dimensional Überlegungen:

$$[\mathbf{A}] = \frac{Js}{Cm} \implies [\langle \mathbf{A} | \mathbf{A}' \rangle] = 1$$

Behauptung:

$$\begin{aligned}\partial_t \langle \mathbf{A} | \mathbf{A} \rangle &= -i \frac{\epsilon_0}{\hbar} \int d^3x \left\{ \ddot{\mathbf{A}}^* \mathbf{A}' + \dot{\mathbf{A}}^* \dot{\mathbf{A}}' - \dot{\mathbf{A}}^* \dot{\mathbf{A}}' - \mathbf{A}^* \ddot{\mathbf{A}}' \right\} \stackrel{!}{=} 0 \\ &\text{verwende hierzu } \frac{1}{c^2} \ddot{\mathbf{A}} - \Delta \mathbf{A} = 0 \\ \implies \partial_t \langle \mathbf{A} | \mathbf{A} \rangle &= -i \frac{\epsilon_0}{\hbar} c^2 \int d^3x \left\{ (\Delta \mathbf{A}^*) \mathbf{A}' - \mathbf{A}^* (\Delta \mathbf{A}') \right\} \\ &= -i \frac{\epsilon_0}{\hbar} c^2 \int d^3x \left\{ \mathbf{A}^* (\Delta \mathbf{A}') - (\Delta \mathbf{A}^*) \mathbf{A}' \right\} \\ &= 0\end{aligned}$$

wobei benutzt wurde, dass $\int (\nabla_i \nabla_i \mathbf{A}_j^*) \mathbf{A}'_j = - \int \nabla_i \mathbf{A}_j^* \nabla_i \mathbf{A}'_j = \int \mathbf{A}_j^* \nabla_i \nabla_i \mathbf{A}'_j$

Normierung der ebenen Wellen $N_{k\sigma} \boldsymbol{\epsilon}_{k\sigma} \exp(i\mathbf{k}\mathbf{x} - i\omega_k t) = \varphi_{k\sigma}(\mathbf{x}, t)$

$$\begin{aligned}\langle \varphi_{k\sigma} | \varphi_{k'\sigma'} \rangle &\stackrel{!}{=} \delta_{\sigma\sigma'} \delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \\ &= -i \frac{\epsilon_0}{\hbar} \int d^3x N_{k\sigma} N_{k'\sigma'} \boldsymbol{\epsilon}_{k\sigma}^* \boldsymbol{\epsilon}_{k'\sigma'} \\ &\quad \left\{ e^{-i\mathbf{k}\mathbf{x}} e^{i\omega_k t} (i\omega_k) e^{i\mathbf{k}'\mathbf{x}} e^{-i\omega_{k'} t} \right. \\ &\quad \left. - e^{-i\mathbf{k}\mathbf{x}} e^{i\omega_{k'} t} (-i\omega_{k'}) e^{i\mathbf{k}'\mathbf{x}} e^{-i\omega_k t} \right\}\end{aligned}$$

mit $\int d^3x e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\mathbf{x}} = (2\pi)^3 \delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}')$ folgt:

$$\begin{aligned}\langle \varphi_{k\sigma} | \varphi_{k'\sigma'} \rangle &= \frac{\epsilon_0}{\hbar} (2\pi)^3 \underbrace{\boldsymbol{\epsilon}_{k\sigma}^* \boldsymbol{\epsilon}_{k'\sigma'}}_{\delta_{\sigma,\sigma'}} \delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}') N_{k\sigma} N_{k'\sigma'} 2\omega_k \\ &= \frac{\epsilon_0}{\hbar} (2\pi)^3 2\omega_k N_{k\sigma}^2 \delta_{\sigma,\sigma'} \delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \\ &\stackrel{!}{=} \delta_{\sigma,\sigma'} \delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}')\end{aligned}$$

$$\implies N_{k\sigma} = \sqrt{\frac{\hbar}{2(2\pi)^3 \epsilon_0 \omega_k}}$$

für $t = 0$ folgt³ also für $\mathbf{A}(\mathbf{x})$:

$$\mathbf{A}(\mathbf{x}) = \int d^3k \sum_{\sigma} A_{k\sigma} \sqrt{\frac{\hbar}{2(2\pi)^3 \epsilon_0 \omega_k}} \boldsymbol{\epsilon}_{k\sigma} \exp(i\mathbf{k}\mathbf{x}) + \text{c.c.} \quad (2.51)$$

³Wir setzen hier $t = 0$ um den zeitunabhängigen Operator für das Vektorpotential (in Coulomb-Eichung) im Schrödinger-Bild herzuleiten. Man kann auch $t \neq 0$ betrachten und erhält einen zeitabhängigen Operator, der das Vektorpotential im Wechselwirkungs-Bild beschreibt.

Quantisierung: Ersetze die Amplitude $A_{k\sigma}$ durch Vernichter $a_{k\sigma}$ mit

$$\left[a_{k\sigma}, a_{k'\sigma'}^\dagger \right] = \delta_{\sigma,\sigma'} \delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}')$$

$a_{k\sigma}^\dagger$ erzeugt ein Photon (= Lichtquant) mit Impuls $\hbar\mathbf{k}$ und Polarisationsvektor $\boldsymbol{\epsilon}_{k\sigma}$.

Im Gegensatz zur klassischen Maxwell-Theorie sind in der QED Intensität und Energie eines Lichtstrahls gequantelt.

Photonen sind Bosonen und haben Spin 1, jedoch nur **zwei** mögliche Werte für die magnetische Quantenzahl $m = +1, -1$. Diese Werte entsprechen den links - bzw. rechtszirkular polarisierten ebenen Wellen: die Polarisation ist also spinfreiheitsgradabhängig. $m = 0$ (\Rightarrow longitudinal polarisierte Photonen $\Leftrightarrow \boldsymbol{\epsilon}_{k\sigma} \parallel \mathbf{k}$) ist verboten, wegen des Verschwindens der Masse der Photonen. Mehr dazu in Abschnitt 14.5 von Ref. [8].

Den elektrischen und magnetischen Feldoperator kann man leicht aus dem Vektorpotential herleiten:

$$\hat{\mathbf{E}}(\mathbf{x}) \Big|_{t=0} = - \dot{\hat{\mathbf{A}}}(\mathbf{x}) \Big|_{t=0} = i \int d^3k \sum_{\sigma} a_{k\sigma} \sqrt{\frac{\hbar\omega_k}{2(2\pi)^3\epsilon_0}} \boldsymbol{\epsilon}_{k\sigma} e^{i\mathbf{k}\mathbf{x}} + \text{H.c.} \quad (2.52)$$

$$\hat{\mathbf{B}}(\mathbf{x}) = \text{rot} \hat{\mathbf{A}}(\mathbf{x}) = i \int d^3k \sum_{\sigma} a_{k\sigma} \sqrt{\frac{\hbar}{2(2\pi)^3\epsilon_0\omega_k}} (\mathbf{k} \times \boldsymbol{\epsilon}_{k\sigma}) e^{i\mathbf{k}\mathbf{x}} + \text{H.c.} \quad (2.53)$$

Der Hamiltonian kann aus der klassischen Energiedichte gewonnen werden:

$$\begin{aligned} \hat{H} &= \frac{\epsilon_0}{2} \int d^3x \left(\hat{\mathbf{E}}^2(\mathbf{x}) + c^2 \hat{\mathbf{B}}^2(\mathbf{x}) \right) = \dots \\ &= \int d^3k \sum_{\sigma} \frac{\hbar\omega_k}{2} \left\{ a_{k\sigma}^\dagger a_{k\sigma} + a_{k\sigma} a_{k\sigma}^\dagger \right\} \\ &= \int d^3k \sum_{\sigma} \hbar\omega_k \left\{ a_{k\sigma}^\dagger a_{k\sigma} + \frac{1}{2} \right\} \end{aligned} \quad (2.54)$$

(\Leftrightarrow Summe harmonischen Oszillatoren)

Die Bewegungsgleichung der Operatoren im Heisenberg-Bild lautet allgemein:

$$i\hbar \partial_t \hat{O}(t) = [\hat{O}(t), \hat{H}] \quad (2.55)$$

hieraus folgt

$$\begin{aligned}
i\hbar\dot{\mathbf{E}}_i(\mathbf{x}, t) &= \left[E_i(\mathbf{x}, t), \int d^3k \sum_{\sigma} \hbar\omega_k \left\{ a_{k\sigma}^{\dagger} a_{k\sigma} + \frac{1}{2} \right\} \right] \\
&= i \int d^3k' \sum_{\sigma'} \sqrt{\frac{\hbar\omega_{k'}}{2(2\pi)^3\epsilon_0}} \\
&\quad \left[a_{k'\sigma'} e^{i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{x}} (\boldsymbol{\epsilon}_{k'\sigma'})_i - a_{k'\sigma'}^{\dagger} e^{-i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{x}} (\boldsymbol{\epsilon}_{k'\sigma'}^*)_i, \int d^3k \sum_{\sigma} \hbar\omega_k \left\{ a_{k\sigma}^{\dagger} a_{k\sigma} + \frac{1}{2} \right\} \right] \\
&= i \int d^3k' \sum_{\sigma'} \int d^3k \sum_{\sigma} \sqrt{\frac{\hbar\omega_{k'}}{2(2\pi)^3\epsilon_0}} \hbar\omega_k \\
&\quad \left\{ e^{i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{x}} (\boldsymbol{\epsilon}_{k'\sigma'})_i \delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \delta_{\sigma\sigma'} a_{k\sigma} - e^{-i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{x}} (\boldsymbol{\epsilon}_{k\sigma}^*)_i a_{k'\sigma'}^{\dagger} (-\delta_{\sigma\sigma'} \delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}')) \right\} \\
&\Rightarrow \dot{\mathbf{E}} = \int d^3k \sum_{\sigma} \omega_k^2 \sqrt{\frac{\hbar}{2(2\pi)^3\epsilon_0\omega_k}} \left(a_{k\sigma} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} \boldsymbol{\epsilon}_{k\sigma} + a_{k\sigma}^{\dagger} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} \boldsymbol{\epsilon}_{k\sigma}^* \right) \quad (2.56)
\end{aligned}$$

Berechne nun $(\text{rot } \mathbf{B})_i$:

$$\begin{aligned}
(\text{rot } \mathbf{B})_i &= i \int d^3k \sum_{\sigma} \varepsilon_{ijl} \frac{\partial}{\partial x_j} a_{k\sigma} (\mathbf{k} \times \boldsymbol{\epsilon}_{k\sigma})_l e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} \sqrt{\frac{\hbar}{2(2\pi)^3\epsilon_0\omega_k}} \\
&\quad - i \int d^3k \sum_{\sigma} \varepsilon_{ijl} \frac{\partial}{\partial x_j} a_{k\sigma}^{\dagger} (\mathbf{k} \times \boldsymbol{\epsilon}_{k\sigma}^*)_l e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} \sqrt{\frac{\hbar}{2(2\pi)^3\epsilon_0\omega_k}} \\
\text{rot } \mathbf{B} &= - \int d^3k \sum_{\sigma} \sqrt{\frac{\hbar}{2(2\pi)^3\epsilon_0\omega_k}} \left(\mathbf{k} \times (\mathbf{k} \times \boldsymbol{\epsilon}_{k\sigma}) a_{k\sigma} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} + \mathbf{k} \times (\mathbf{k} \times \boldsymbol{\epsilon}_{k\sigma}^*) a_{k\sigma}^{\dagger} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} \right) \quad (2.57)
\end{aligned}$$

Mit $\mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\epsilon}_{k\sigma} = 0$ erhält man außerdem:

$$\mathbf{k} \times (\mathbf{k} \times \boldsymbol{\epsilon}_{k\sigma}) = \mathbf{k}(\mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\epsilon}_{k\sigma}) - \boldsymbol{\epsilon}_{k\sigma} k^2 = -\boldsymbol{\epsilon}_{k\sigma} k^2 \quad (2.58)$$

Woraus dann folgt:

$$\text{rot } \mathbf{B} = \int d^3k \sum_{\sigma} \sqrt{\frac{\hbar}{2(2\pi)^3\epsilon_0\omega_k}} k^2 \{ a_{k\sigma} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} \boldsymbol{\epsilon}_{k\sigma} + a_{k\sigma}^{\dagger} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} \boldsymbol{\epsilon}_{k\sigma}^* \} \quad (2.59)$$

$$\Rightarrow \text{rot } \mathbf{B} = \frac{1}{c^2} \dot{\mathbf{E}} = \mu_0 \epsilon_0 \dot{\mathbf{E}} \quad (2.60)$$

Dies ist eine der inhomogenen Maxwell-Gleichungen für $\mathbf{j} = 0$ (andernfalls gilt ja $\text{rot } \mathbf{B} = \frac{1}{c^2} \dot{\mathbf{E}} = \mu_0 \{\mathbf{j} + \epsilon_0 \dot{\mathbf{E}}\}$). Analog findet man

$$i\hbar\dot{\mathbf{B}} = [\mathbf{B}, H] = \dots$$

$$\Rightarrow \dot{\mathbf{B}} = -\text{rot } \mathbf{E} \quad (2.61)$$

Außerdem gilt wegen $\mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\varepsilon}_{k\sigma} = \mathbf{k} \cdot (\mathbf{k} \times \boldsymbol{\varepsilon}_{k\sigma}) = 0$

$$\text{div } \mathbf{B} = 0 \quad (2.62)$$

und

$$\text{div } \mathbf{E} = 0 \quad \left(= \frac{\rho}{\varepsilon_0} \right) \quad (2.63)$$

\Rightarrow *Die Feldoperatoren erfüllen die Maxwell-Gleichungen im Vakuum*

Die Bewegungsgleichungen lassen sich leicht lösen, wenn man die einzelnen Moden betrachtet:

$$\begin{aligned} i\hbar \dot{a}_{k\sigma} &= [a_{k\sigma}, H] \\ &= \left[a_{k\sigma}, \int d^3k' \sum_{\sigma'} \hbar\omega_{k'} \left(a_{k'\sigma'}^\dagger a_{k'\sigma'} + \frac{1}{2} \right) \right] \\ &= \int d^3k' \sum_{\sigma'} \hbar\omega_{k'} \delta_{\sigma\sigma'} \delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}') a_{k'\sigma'} \\ &= \hbar\omega_k a_{k\sigma} \end{aligned} \quad (2.64)$$

Die Lösung dieser Differentialgleichung lautet

$$a_{k\sigma} = e^{-i\omega_k t} a_{k\sigma}(0)$$

$a_{k\sigma}(0)$ ist dabei der Schrödinger-Operator für die entsprechende Mode. Die Lösung hat dieselbe Struktur wie die entsprechende klassische Welle.

Bemerkungen zum Faktor $\frac{1}{2}$ im Hamiltonian:

Dieser Term ist eine Konstante und hat daher keinen Einfluß auf die Dynamik. Er repräsentiert die Vakuumenergie und ist divergent. Er hängt jedoch von den Randbedingungen an die Moden ab.

Beispiel: Zwei Spiegel im Abstand L (siehe Abbildung 2.1). Die Spiegel implizieren Randbedingungen für das Maxwell-Feld. Die Folge davon ist, dass nur diskrete Wellenzahlen mit $k_n = \frac{2\pi}{L}n$, $n \in \mathbb{N}$ statt $|\mathbf{k}| \in \mathbb{R}$ zugelassen sind. Entsprechend wird im Hamiltonian nur über die diskreten Wellenvektoren summiert, so dass sich die Vakuumenergie ändert.

Subtrahiert man die freie Vakuumenergie von der zwischen den beiden Spiegeln, so erhält man eine endliche Energie-Differenz, die vom Abstand L abhängt. Dies führt zu einer anziehenden Kraft (*Casimir-Kraft*) zwischen den Spiegeln. Casimir-Kräfte werden ausführlich in Ref. [7] behandelt.

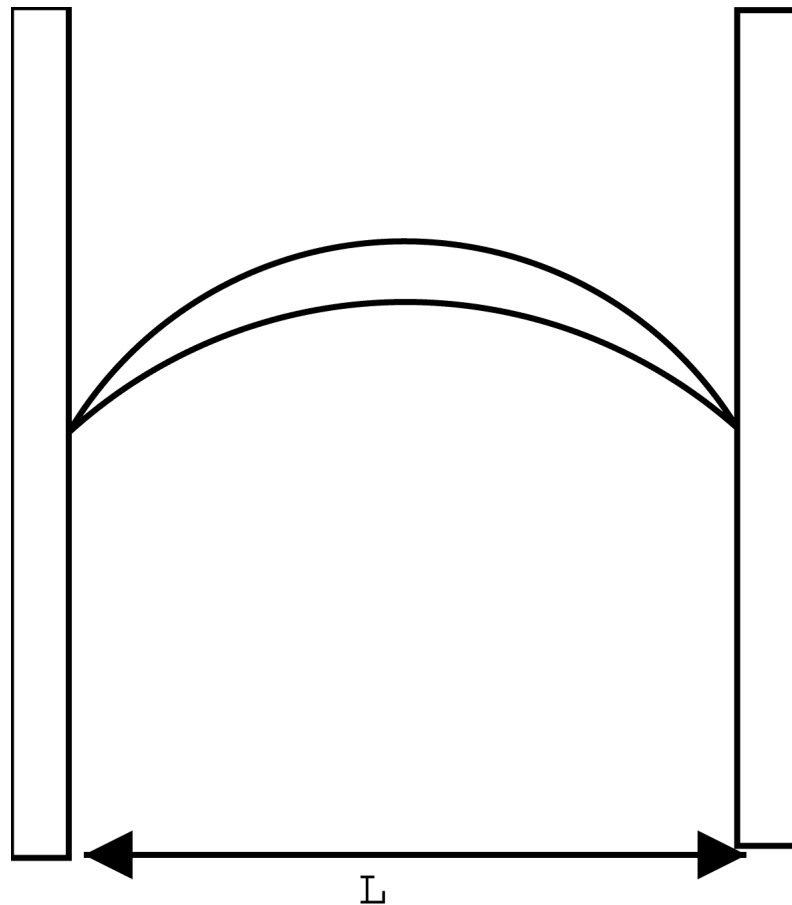


Abbildung 2.1: Skizze zu Casimir-Effekt

2.2 Kohärente Zustände

Kohärente Zustände sind die bei weitem wichtigsten in der Quantenoptik. Sie bilden eine quantenmechanische Beschreibung klassischer Felder.

Betrachte eine Mode a , $[a, a^\dagger] = 1$ des elektromagnetischen Feldes. Verschiedene Definitionen des kohärenten Zustands $|\alpha\rangle$:

- Eigenzustand von a : $a|\alpha\rangle = \alpha|\alpha\rangle$, $\alpha \in \mathbb{C}$
- Zustand minimaler Unschärfe (siehe Übungen)
- “Verschiebung des Vakuums”

Was ist $a|\alpha\rangle$? Entwickle $|\alpha\rangle$ nach Fock-Zuständen:

$$|\alpha\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} \alpha_n |n\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\alpha_n}{\sqrt{n!}} (a^\dagger)^n |0\rangle$$

$$\Rightarrow a|\alpha\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} \alpha_n a|n\rangle = \sum_{n=1}^{\infty} \alpha_n \sqrt{n} |n-1\rangle$$

Mit $n' = n - 1$ ergibt sich damit:

$$a|\alpha\rangle = \sum_{n'=0}^{\infty} \alpha_{n'+1} \sqrt{n'+1} |n'\rangle \stackrel{!}{=} \alpha|\alpha\rangle = \alpha \sum_{n'=0}^{\infty} \alpha_{n'} |n'\rangle$$

Daraus folgt die Relation $\alpha_{n+1} = \alpha \frac{\alpha_n}{\sqrt{n+1}}$, wobei α_0 noch durch die Normierung festgelegt wird. Aus

$$\begin{aligned} \alpha_1 &= \alpha \alpha_0 \\ \alpha_2 &= \frac{\alpha^2}{\sqrt{2!}} \alpha_0 \\ \alpha_3 &= \frac{\alpha^3}{\sqrt{3!}} \alpha_0 \text{ usw.} \end{aligned}$$

folgt

$$\alpha_n = \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} \alpha_0 \quad (2.65)$$

Damit ergibt sich nun:

$$|\alpha\rangle = \alpha_0 \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} |n\rangle = \alpha_0 \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\alpha^n}{n!} (a^\dagger)^n |0\rangle = \alpha_0 \exp(\alpha a^\dagger) |0\rangle$$

Unter Verwendung von $\langle n|m\rangle = \delta_{nm}$ und Gleichung (2.65) erhält man dann

$$\langle \alpha|\alpha\rangle = 1 = |\alpha_0|^2 \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(\alpha^*)^n}{\sqrt{n!}} \langle n| \sum_{m=0}^{\infty} \frac{\alpha^m}{\sqrt{m!}} |m\rangle = |\alpha_0|^2 \sum_{n=0}^{\infty} \frac{|\alpha|^{2n}}{n!} = |\alpha_0|^2 \exp |\alpha|^2 \stackrel{!}{=} 1$$

woraus sich dann

$$\alpha_0 = \exp\left(-\frac{|\alpha|^2}{2}\right) \quad (2.66)$$

ergibt. Insgesamt können wir nun $|\alpha\rangle$ darstellen als

$$|\alpha\rangle = \exp\left(-\frac{|\alpha|^2}{2}\right) \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} |n\rangle = \exp\left(-\frac{|\alpha|^2}{2}\right) \exp(\alpha a^\dagger) |0\rangle \quad (2.67)$$

$|\alpha\rangle$ kann auch mit dem *Verschiebe-Operator*

$$D(\alpha) = \exp(\alpha a^\dagger - \alpha^* a) \quad (2.68)$$

konstruiert werden. Die Baker-Campbell-Hausdorf-Gleichung lautet:

$$e^{(A+B)} = e^A e^B e^{-\frac{1}{2}[A,B]} e^{-\frac{1}{6}[A,[A,B]]} \dots \quad (2.69)$$

Mit $A = \alpha a^\dagger$ und $B = -\alpha^* a$ folgt nun

$$-\frac{1}{2}[A, B] = -\frac{1}{2}(-|\alpha|^2)[a^\dagger, a] = -\frac{|\alpha|^2}{2} \in \mathbb{R}$$

$$\Rightarrow [A, [A, B]] = 0$$

Damit ergibt sich mit Gleichung (2.69) folgende Darstellung des Verschiebe-Operators:

$$D(\alpha) = e^{\alpha a^\dagger} e^{-\alpha^* a} e^{-\frac{|\alpha|^2}{2}} \quad (2.70)$$

Daraus ergeben sich folgende Eigenschaften des Verschiebe-Operators:

- $D(\alpha)$ ist unitär:

$$D^\dagger(\alpha) = e^{\alpha^* a - \alpha a^\dagger} = e^{-(\alpha a^\dagger - \alpha^* a)} = D^{-1}(\alpha) = D(-\alpha)$$

- Es gilt die Beziehung

$$|\alpha\rangle = D(\alpha) |0\rangle \quad (2.71)$$

Aus Gleichung (2.71) wird ersichtlich, dass man das Vakuum als speziellen kohärenten Zustand mit $\alpha = 0$ auffassen kann.

In den Übungen wurde gezeigt, dass ⁴

$$E \sim a + a^\dagger \quad (2.72)$$

$$B \sim i(a^\dagger - a) \quad (2.73)$$

Damit ergibt sich:

$$\bar{E} = \langle \alpha | E | \alpha \rangle = \langle \alpha | a + a^\dagger | \alpha \rangle = \alpha + \alpha^* = 2\text{Re } \alpha \quad (2.74)$$

$$\bar{B} = \langle \alpha | B | \alpha \rangle = \langle \alpha | i(a^\dagger - a) | \alpha \rangle = i(\alpha^* - \alpha) = 2\text{Im } \alpha \quad (2.75)$$

$$\begin{aligned} (\Delta E)^2 &= \langle E^2 \rangle - \bar{E}^2 \\ &= \langle \alpha | a^2 + aa^\dagger + a^\dagger a + (a^\dagger)^2 | \alpha \rangle - (\alpha - \alpha^*)^2 \\ &= \alpha^2 + (\alpha^*)^2 + \alpha^* \alpha + \langle \alpha | aa^\dagger | \alpha \rangle - (\alpha - \alpha^*)^2 \\ &= \alpha^2 + (\alpha^*)^2 + \alpha^* \alpha + \langle \alpha | a^\dagger a + [a, a^\dagger] | \alpha \rangle - (\alpha - \alpha^*)^2 \\ &= \alpha^2 + (\alpha^*)^2 + \alpha^* \alpha + \langle \alpha | a^\dagger a + 1 | \alpha \rangle - (\alpha - \alpha^*)^2 \\ &= \alpha^2 + (\alpha^*)^2 + 2\alpha\alpha^* + 1 - \alpha^2 - (\alpha^*)^2 - 2\alpha\alpha^* \\ &= 1 \end{aligned} \quad (2.76)$$

⁴Genaugenommen kommt es dabei auf die Wahl der Polarisierung und der Phase an. Für eine einzelne Mode gilt $\mathbf{A} \propto a \exp(ikx)\boldsymbol{\epsilon} + a^\dagger \exp(-ikx)\boldsymbol{\epsilon}^*$ und somit $\mathbf{E} = -\dot{\mathbf{A}} \propto i\omega a \exp(ikx)\boldsymbol{\epsilon} + (-i\omega)a^\dagger \exp(-ikx)\boldsymbol{\epsilon}^*$ sowie $\mathbf{B} = \text{rot } \mathbf{A} \propto ia \exp(ikx)\mathbf{k} \times \boldsymbol{\epsilon} + (-i)a^\dagger \exp(-ikx)\mathbf{k} \times \boldsymbol{\epsilon}^*$. Wählt man nun z.B. zirkular polarisiertes Licht ($\boldsymbol{\epsilon} \propto \mathbf{e}_x + i\mathbf{e}_y$) und den Ort $\mathbf{x} = 0$, so ergeben sich nachfolgenden Beziehungen für die y -Komponenten der Felder.

$\Rightarrow \Delta E$ ist unabhängig von α . Analoge Rechnung für ΔB :

$$(\Delta B)^2 = \dots = 1 \quad (2.77)$$

$$\Rightarrow \Delta E \Delta B = 1 \quad (2.78)$$

Die allgemeine Heisenberg'sche Unschärferelation für zwei (beliebige) hermitesche Operatoren lautet $\Delta E \Delta B \geq |\langle [E, B] \rangle|/2$. Hieraus kann man ersehen, dass kohärente Zustände minimale Unschärfe haben.

\Rightarrow Man kann kohärente Zustände durch eine Amplitude $\alpha \in \mathbb{C}$ und eine Unschärfe 1 charakterisieren. Graphisch:

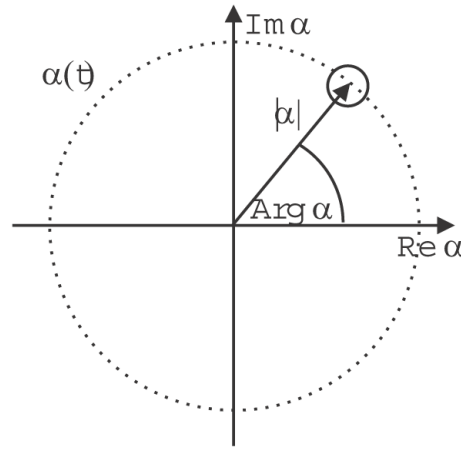


Abbildung 2.2: Veranschaulichung eines kohärenten Zustandes durch eine komplexe Amplitude mit Unschärfe 1 (kleiner Kreis). Der gestrichelte Kreis beschreibt die (freie) Zeitentwicklung der Amplitude.

Freie Zeitentwicklung kohärenter Zustände:

$$|\alpha(t)\rangle = U(t) |\alpha(0)\rangle \propto U e^{\alpha a^\dagger} |0\rangle = U e^{\alpha a^\dagger} U^\dagger U |0\rangle$$

$$U |0\rangle = |0\rangle \Rightarrow |\alpha(t)\rangle = U e^{\alpha a^\dagger} U^\dagger |0\rangle$$

$$\begin{aligned} U e^A U^\dagger &= U \left(1 + A + \frac{A^2}{2} + \dots \right) U^\dagger \\ &= U U^\dagger + U A U^\dagger + \frac{1}{2} U A (U^\dagger U) A U^\dagger + \dots \\ &= 1 + U A U^\dagger + \frac{1}{2} (U A U^\dagger)^2 + \dots \\ &= \exp(U A U^\dagger) \end{aligned} \quad (2.79)$$

$$\Rightarrow U e^{\alpha a^\dagger} U^\dagger = e^{\alpha U a^\dagger U^\dagger} = \exp(\alpha e^{-i\omega t} a^\dagger) \quad (2.80)$$

$$\Rightarrow |\alpha(t)\rangle = |\alpha e^{-i\omega t}\rangle \quad (2.81)$$

Kohärente Zustände bleiben also kohärent, ihre Zeitentwicklung beschreibt einen Kreis um den Ursprung der komplexen Ebene.

- Kohärente Zustände sind *nicht diagonal*:

$$\langle \alpha | \beta \rangle = e^{\frac{-|\alpha|^2}{2}} e^{\frac{-|\beta|^2}{2}} e^{\alpha^* \beta} \quad (2.82)$$

Herleitung: Über Entwicklung nach Fock-Zuständen oder über Verschiebeoperator und Baker-Hausdorffformel (Gleichung (2.69) auf Seite 34).

- Kohärente Zustände sind *überevollständig*:

$$\int d^2\alpha |\alpha\rangle \langle \alpha| = \pi \mathbf{1} \quad (2.83)$$

Beweis: Entwicklung nach Fock-Zuständen, Integration über Winkel.

2.3 Klassische und quantenmechanische Interferenz

Der Unterschied zwischen klassischer und quantenmechanischer Interferenz ist auf den ersten Blick subtil, lässt sich aber mit kohärenten Zuständen gut verstehen. Sei also $|\psi\rangle = |\alpha\rangle = D(\alpha)|0\rangle$; $D^\dagger(\alpha) = D^{-1}(\alpha)$

$D(\alpha)$ kann verwendet werden, um zu einem unitär äquivalenten „Bild“ überzugehen, bei dem der Zustand $|\tilde{\psi}\rangle = D^{-1}(\alpha)|\psi\rangle$ durch das Vakuum gegeben ist.

Operatoren-Trafo:

$$\hat{\tilde{O}} = D^\dagger(\alpha) \hat{O} D(\alpha) \quad (2.84)$$

$$(\iff \langle \tilde{\psi} | \hat{\tilde{O}} | \tilde{\psi} \rangle = \langle \psi | \hat{O} | \psi \rangle)$$

$$\begin{aligned} \tilde{\mathbf{E}}(x) &= D^\dagger(\alpha) \mathbf{E}(x) D(\alpha) \\ &= \sum_{a_{k\sigma} \neq a} (a_{k\sigma} \dots e^{i\mathbf{k}\mathbf{x}} + \text{H.c.}) + i \sqrt{\frac{\hbar\omega_a}{2(2\pi)^3\epsilon_0}} \boldsymbol{\epsilon}_a e^{i\mathbf{k}\mathbf{x}} D^\dagger(\alpha) a D(\alpha) + \text{H.c.} \\ &= \int dk \sum_{\sigma} a_{k\sigma} \dots + \text{H.c.} + i \sqrt{\dots} \boldsymbol{\epsilon}_a e^{i\mathbf{k}\mathbf{x}} D^\dagger a D + \text{H.c.} \end{aligned}$$

Was ist $D^\dagger(\alpha)aD(\alpha)$?

Benutze das Theorem:

$$\boxed{e^A B e^{-A} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} k_n} \quad k_0 = B; \quad k_{n+1} = [A, k_n] \quad (2.85)$$

$$\begin{aligned} \Rightarrow A &= \alpha^* a - \alpha a^\dagger; B = a \\ \Rightarrow k_0 &= a; k_1 = [\alpha^* a - \alpha a^\dagger, a] = \alpha \\ \Rightarrow k_2 &= k_3 = \dots = 0 \\ \Rightarrow \boxed{D^\dagger(\alpha)aD(\alpha) &= a + \alpha} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \tilde{\mathbf{E}}(x) &= \mathbf{E}_{\text{Alle anderen Moden}} + (i\sqrt{\dots}\epsilon_a e^{i\mathbf{k}x} a - i\sqrt{\dots}\epsilon_a^* e^{-i\mathbf{k}x} a^\dagger) \\ &\quad + (i\alpha\sqrt{\dots}\epsilon_a e^{i\mathbf{k}x} - i\sqrt{\dots}\epsilon_a^* \alpha^* e^{-i\mathbf{k}x}) \\ \Rightarrow \boxed{\tilde{\mathbf{E}}(x) &= \mathbf{E}(x) + \mathbf{E}_a^{\text{klassisch}}(x)} \end{aligned} \quad (2.86)$$

Der Zustand $|\alpha\rangle$ in Abwesenheit äußerer Felder ist unitär äquivalent zum Vakuum mit dem äußeren Feld $\mathbf{E}_a^{\text{klass.}}(x)$ (und $\mathbf{B}_a^{\text{klass.}}(x)$).

Damit läßt sich der Unterschied zwischen der Interferenz von Photonen und klassischer Maxwell-Felder verstehen:

- Klassische Interferenz:

$$\mathbf{E} = \mathbf{E}_1 + \mathbf{E}_2, \quad \text{z.B. } \mathbf{E}_i \propto e^{i\mathbf{k}_i x}$$

$$\begin{aligned} I \propto \mathbf{E}\mathbf{E}^* &= |\mathbf{E}_1|^2 + |\mathbf{E}_2|^2 + 2\text{Re}(\mathbf{E}_1\mathbf{E}_2^*) \\ 2\text{Re}(\mathbf{E}_1\mathbf{E}_2^*) &\propto \cos(\mathbf{x}(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2)) \end{aligned}$$

- Quantenmechanische Beschreibung klassischer Interferenz:

$$\begin{aligned} |\psi\rangle &= |\alpha_1, \alpha_2\rangle \\ &= D_1(\alpha_1)D_2(\alpha_2)|0\rangle \\ D_1(\alpha_1) &= e^{\alpha_1 a_1^\dagger - \alpha_1^* a_1} \\ D_2(a_2) &\quad \text{analog} \end{aligned}$$

Das Produkt $D_1 D_2$ erzeugt die Summe klassischer Felder:

$$D_2^\dagger D_1^\dagger \hat{\mathbf{E}} D_1 D_2 = D_2^\dagger (\hat{\mathbf{E}} + \mathbf{E}_1) D_2 = \hat{\mathbf{E}} + \mathbf{E}_1 + \mathbf{E}_2$$

Transformiere mittels $D_2^\dagger D_1^\dagger$ von $|\psi\rangle$ auf den Vakuumzustand:

$$\begin{aligned} I \propto \langle \psi | \mathbf{E}^{(-)} \mathbf{E}^{(+)} | \psi \rangle &= \langle 0 | (\hat{\mathbf{E}}^{(-)} + \mathbf{E}_1^* + \mathbf{E}_2^*) (\hat{\mathbf{E}}^{(+)} + \mathbf{E}_1 + \mathbf{E}_2) | 0 \rangle \\ &= |\mathbf{E}_1 + \mathbf{E}_2|^2 \\ &\Longleftrightarrow \text{klassisches Interferenzbild} \end{aligned}$$

Im Gegensatz zu klassischen Feldern kann man in der Quantenmechanik auch kohärente Zustände überlagern:

$$|\psi\rangle = |\alpha_1\rangle + |\alpha_2\rangle = (D_1(\alpha_1) + D_2(\alpha_2)) |0\rangle$$

Interferenzmuster dieses Zustandes:

$$\begin{aligned} I &\propto \langle \psi | \hat{\mathbf{E}}^{(-)} \hat{\mathbf{E}}^{(+)} | \psi \rangle \\ &= \langle 0 | (D_1^\dagger + D_2^\dagger) \hat{\mathbf{E}}^{(-)} \hat{\mathbf{E}}^{(+)} (D_1 + D_2) | 0 \rangle \\ &= \langle 0 | (D_1^\dagger \mathbf{E}^{(-)} \mathbf{E}^{(+)} D_1 + D_1^\dagger \mathbf{E}^{(-)} \mathbf{E}^{(+)} D_2 + D_2^\dagger \mathbf{E}^{(-)} \mathbf{E}^{(+)} D_1 + D_2^\dagger \mathbf{E}^{(-)} \mathbf{E}^{(+)} D_2) | 0 \rangle \\ &= |\mathbf{E}_1|^2 + |\mathbf{E}_2|^2 + \langle 0 | (D_1^\dagger \mathbf{E}^{(-)} \mathbf{E}^{(+)} D_2 + D_2^\dagger \mathbf{E}^{(-)} \mathbf{E}^{(+)} D_1) | 0 \rangle \\ &= |\mathbf{E}_1|^2 + |\mathbf{E}_2|^2 + \langle \alpha_1 | \mathbf{E}^{(-)} \mathbf{E}^{(+)} | \alpha_2 \rangle + \langle \alpha_2 | \mathbf{E}^{(-)} \mathbf{E}^{(+)} | \alpha_1 \rangle \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \Rightarrow I &\propto |\mathbf{E}_1|^2 + |\mathbf{E}_2|^2 + E_1^* E_2 \langle \alpha_1 | \alpha_2 \rangle + E_2^* E_1 \langle \alpha_2 | \alpha_1 \rangle \\ \langle \alpha_1 | \alpha_2 \rangle &= e^{-\frac{|\alpha_1|^2}{2}} e^{-\frac{|\alpha_2|^2}{2}} e^{\alpha_1^* \alpha_2} \\ \Rightarrow |\langle \alpha_1 | \alpha_2 \rangle|^2 &= \dots = e^{-|\alpha_1 - \alpha_2|^2} \end{aligned}$$

\Rightarrow Für $|\alpha_1 - \alpha_2| \gg 1$ ist die Quanteninterferenz stark unterdrückt. Für ein klassisches Feld mit großer Anzahl von Photonen $|\alpha|^2 \gg 1$ spielt sie daher keine Rolle. Der Zustand $|\alpha_1\rangle + |\alpha_2\rangle$ wird auch Schrödinger cat state genannt, da er einer Superposition makroskopischer Zustände entspricht (für $|\alpha_i|^2 \gg 1$).

2.4 Bemerkungen zum Problem der Quantisierung in anderen Eichungen

Die Tatsache, daß nur $\hat{\mathbf{A}}$ und nicht ϕ quantisiert wurde, hängt mit der Coulomb-Eichung zusammen.

Grund: $\square \mathbf{A} = 0 \quad \Delta \phi = 0$

$\Rightarrow \phi$ ist nicht dynamisch, sein konjugierter Impuls verschwindet.

Das sieht man gut an der Lagrange-Funktion:

$$\begin{aligned}
 L &= \frac{1}{2} \int (\mathbf{E}^2 - c^2 \mathbf{B}^2) d^3x \\
 &= \frac{1}{2} \int [(-\nabla\phi - \dot{\mathbf{A}})^2 - c^2 (\text{rot}\mathbf{A})^2] d^3x \\
 &= \frac{1}{2} \int [(\nabla\phi)^2 + 2\phi \text{div}\dot{\mathbf{A}} + \dot{\mathbf{A}}^2 - c^2 (\text{rot}\mathbf{A}^2)] d^3x \\
 &= \int \mathcal{L} d^3x
 \end{aligned}$$

Coulomb-Eichung:

$$\text{div}\mathbf{A} = 0 \implies \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\phi}} = 0$$

Lorentz-Eichung:

$$\text{div}\mathbf{A} + \frac{1}{c^2} \dot{\phi} = 0 \implies L = \frac{1}{2} \int [(\nabla\phi)^2 - 2\phi \ddot{\phi} \frac{1}{c^2} + \dot{\mathbf{A}}^2 - c^2 (\text{rot}\mathbf{A}^2)] d^3x$$

Betrachtet man jetzt die Wirkung $S = \int L dt$, so kann man den Term $\propto \ddot{\phi}$ partiell integrieren und erhält damit eine neue Lagrange-Dichte $\mathcal{L}' \propto \dot{\phi}^2$. Damit wird $\partial \mathcal{L}' / \partial \dot{\phi} \neq 0$ und der skalare kanonische Impuls verschwindet nicht.

\implies In der Lorentz-Eichung erhält man daher nicht nur zwei zirkular polarisierte Photonen, sondern auch ein skalares ($\iff \phi$) und ein longitudinal polarisiertes ($\iff \text{div}\mathbf{A} \neq 0$). Die beiden letzteren sind unphysikalisch und müssen durch geeignete Nebenbedingungen an die Zustände entfernt werden: $(\text{div}\hat{\mathbf{A}} + \dot{\phi}/c^2) |\psi\rangle \stackrel{!}{=} 0$ für die physikalischen Zustände $|\psi\rangle$.

Eine einheitliche Vorschrift zur Quantisierung von Systemen mit Nebenbedingungen wurde von Dirac entwickelt, ist aber schwierig (Siehe z.B. Kapitel 1 in Ref. [9])

Kapitel 3

Quantenmechanik der Atome: ein kurzer Überblick

3.1 Das Wasserstoffatom, Parität

Hamilton-Operator für ein Proton, ein Elektron (V Coulombpotential):

$$H = \frac{\mathbf{p}_p^2}{2M_p} + \frac{\mathbf{p}_e^2}{2m_e} + V(|\mathbf{x}_p - \mathbf{x}_e|) \quad (3.1)$$

Mit $\mathbf{R} = \frac{1}{M_p + m_e}(M_p \mathbf{x}_p + m_e \mathbf{x}_e)$ Schwerpunktkoordinate, $\mathbf{r} = \mathbf{x}_e - \mathbf{x}_p$ Relativkoordinate, $M = M_p + m_e$, $\frac{1}{\mu} = \frac{1}{M_p} + \frac{1}{m_e}$ ergibt sich:

$$H = \frac{\mathbf{P}^2}{2M} + \frac{\mathbf{p}^2}{2\mu} + V(|\mathbf{r}|) \quad (3.2)$$

In der Atomphysik spielt die Relativbewegung die zentrale Rolle, in der Atomoptik die Schwerpunktbewegung.

Führe *sphärische Koordinaten* für die Relativbewegung ein:

$$\Rightarrow \frac{\mathbf{p}^2}{2\mu} = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \cdot \left(\frac{1}{r} \partial_r r \partial_r - \frac{\hat{\mathbf{L}}^2}{r^2} \right) \quad (3.3)$$

Dabei ist $\mathbf{p} = -i\hbar\nabla$ und $\hat{\mathbf{L}}$ der Bahndrehimpulsoperator. Es gilt $[\hat{\mathbf{L}}, |\mathbf{r}|] = 0$. Eigenfunktionen von H sind auch Eigenfunktionen von L:

$$\begin{aligned} \psi &= Y_{lm}(\theta, \phi) f_l(r) \\ \hat{L}^2 Y_{lm} &= \hbar^2 l(l+1) Y_{lm} \end{aligned} \quad (3.4)$$

Der Radialanteil $f_l(r)$ der Wellenfunktion erfüllt dann

$$E f_l = \left(-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{1}{r} \partial_r r \partial_r + \frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{l(l+1)}{r^2} + V(r) \right) f_l \quad (3.5)$$

Lösung: $f_{nl} \sim r^l \exp\left(-\frac{r}{na_0}\right) \cdot \text{Laguerre-Polynome}$, $a_0 = \text{Bohr-Radius} \approx 0,5 \text{ \AA}$.

$$\Rightarrow \Psi_{nlm} = f_{nl} Y_{lm}(\theta, \phi) \Longleftrightarrow |nlm\rangle \text{ (elektronischer Zustand)} \quad (3.6)$$

Hierbei bezeichnet n die Hauptquantenzahl, l die Drehimpulsquantenzahl und m die magnetische Quantenzahl. Zusätzlich: *Spin* s des Elektrons, $s = \pm \frac{1}{2}$, $|\psi\rangle = |nlms\rangle$.

Parität:

$$\begin{aligned} \mathbf{r} &\longrightarrow -\mathbf{r} \\ |\mathbf{r}| &\longrightarrow |\mathbf{r}| \\ Y_{lm}(\theta, \phi) &\longrightarrow Y_{lm}(\pi - \theta, \phi + \pi) = (-1)^l Y_{lm}(\theta, \phi) \end{aligned} \quad (3.7)$$

\Rightarrow Parität von $|nlms\rangle$ ist $(-1)^l$.

Die Parität ist wichtig für die Auswahlregeln der Dipolstrahlung.

3.2 Feinstruktur und Spin

Allgemein von großer praktischer Relevanz ist die Wechselwirkung mit einem Magnetfeld:

$$H = -\boldsymbol{\mu} \cdot \mathbf{B} \quad (3.8)$$

Dabei ist $\boldsymbol{\mu}$ das magnetische Dipolmoment des Atoms. Ein klassisches Teilchen mit Drehimpuls \mathbf{L} (z.B. auf Kreisbahn) und Ladung q hat das magn. Moment

$$\boldsymbol{\mu} = \frac{q}{2M} \mathbf{L}. \quad (3.9)$$

Das Elektron liefert den Bahnbeitrag:

$$\boldsymbol{\mu}_e = -\frac{e}{2m_e} \hat{\mathbf{L}} \quad (3.10)$$

Für das Proton ergibt sich wegen $M_p \gg m_e$:

$$\boldsymbol{\mu}_p = +\frac{e}{2M_p} \hat{\mathbf{L}} \ll \boldsymbol{\mu}_e \quad (3.11)$$

Spin des Elektrons: ¹

$$-\frac{e}{2m_e} 2\mathbf{S} = -\frac{\hbar e}{2m_e} \boldsymbol{\sigma}. \quad (3.12)$$

Die Feinstruktur entsteht dadurch, dass im Ruhesystem des Elektrons der Kern um das Elektron rotiert und dabei ein Magnetfeld erzeugt.

¹Der Faktor 2, der im Unterschied zum Bahndrehimpuls auftritt, wird gyromagnetischer Faktor g genannt. Aus der Dirac-Gleichung, die ein relativistisches Elektron beschreibt, folgt $g = 2$. Auf Grund der Vakuumfluktuationen des elektromagnetischen Feldes ergeben sich aber kleine Abweichungen von diesem Wert ($g \approx 2,002$).

Kernsystem: elektrisches Feld $\mathbf{E} = -\nabla V_{Coul}$, $\mathbf{B} = 0$ (der Kern erzeugt kein Magnetfeld, da er ruht).

Lorentztransformation ins Ruhesystem des Elektrons ²:

$$\begin{aligned}\mathbf{B}' &= \mathbf{v} \times \mathbf{E} \\ &= -\mathbf{v} \times \nabla V_{Coul} \\ &= -\frac{1}{M} \mathbf{p} \times \nabla V_{Coul}\end{aligned}\tag{3.13}$$

Dabei ist \mathbf{v} die Geschwindigkeit.

$$\begin{aligned}V_{Coul} &= V_{Coul}(|\mathbf{r}|) \implies \nabla V_{Coul} = \mathbf{e}_r \partial_r V_{Coul} = \mathbf{r} \frac{1}{r} \partial_r V_{Coul} \\ \implies \mathbf{B}' &= -\frac{1}{M} \left(\frac{1}{r} \partial_r V_{Coul} \right) \mathbf{p} \times \mathbf{r} = \frac{1}{M} \left(\frac{1}{r} \partial_r V_{Coul} \right) \mathbf{L}^{(e^-)}\end{aligned}\tag{3.14}$$

Es existiert also eine Kopplung zwischen Spin und Bahndrehimpuls des Elektrons:

$$\begin{aligned}H_{SB} &= -\mu_e \boldsymbol{\sigma} \mathbf{B}' \\ &= \mu_e \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{L} \left(\frac{1}{r} \partial_r V_{Coul} \right)\end{aligned}\tag{3.15}$$

Eine exakte Berechnung der Matrixelemente $\langle n'l'm's' | H_{SB} | nlm s \rangle$ inklusive relativistischer Korrekturen ergibt:

$$\begin{aligned}\Delta E_{FS} &= -\frac{1}{2} m_e c^2 (\alpha Z)^4 \frac{1}{h^3} \left(\frac{1}{j + \frac{1}{2}} - \frac{3}{4n} \right) \\ \Delta E_{FS} / \hbar &\approx 100 GHz\end{aligned}\tag{3.16}$$

Hierbei bezeichnet $j = l \pm \frac{1}{2}$ den Gesamtdrehimpuls des Elektrons.

Ohne relativistische Korrekturen würde ΔE_{FS} von l und s statt von $j = l + s$ abhängen.

3.3 Hyperfeinstruktur

Die Hyperfeinstruktur hat zwei Ursachen:

1. Wechselwirkung zwischen dem Drehimpuls des Elektrons und dem Kernspin
2. QED Korrekturen (Vakuumfluktuationen)

²Eigentlich bewegt sich das Elektron auf einer nicht-inertialen Kreisbahn und man muß anders vorgehen. Das Ergebnis stimmt aber bis auf einen Faktor 1/2 (Thomas-Faktor) mit dem korrekten Resultat überein und der hier beschriebene Weg enthält die wesentliche Physik.

Zu 1.: Ein magnetisches Dipolmoment erzeugt ein Magnetfeld, mit dem andere magnetische Dipole wechselwirken. Beim H-Atom erzeugt der Gesamtdrehimpuls $\mathbf{j} = \mathbf{s} + \mathbf{l}$ des Elektrons ein Magnetfeld am Kern, mit dem der Kernspin wechselwirkt.

Hyperfeinspin:

$$\mathbf{F} = \mathbf{S}_k + \mathbf{j} \quad (3.17)$$

Es muß hierbei angemerkt werden, dass die Addition von \mathbf{S}_k und \mathbf{j} zum Hyperfeinspin *nicht äquivalent* zu der Addition von Gesamtspin $\mathbf{S}_G = \mathbf{S}_k + \mathbf{S}_e$ und elektronischem Bahndrehimpuls \mathbf{L} zu \mathbf{F} ist. Dies geschieht, obwohl die Operatoren eigentlich exakt die gleichen sind. Der Grund liegt darin, dass man bei der Addition von Drehimpulsen immer eine bestimmte Basis assoziiert, die den Gesamtdrehimpuls diagonalisiert. Diese Basis ist verschieden je nachdem, welche der beiden Zerlegungen $\mathbf{F} = \mathbf{S}_k + \mathbf{j}$ beziehungsweise $\mathbf{F} = \mathbf{S}_G + \mathbf{L}$ man verwendet. Siehe dazu Anhang 12.2

Kapitel 4

Die Wechselwirkung von Atomen und Licht

4.1 Die minimale Kopplung

Die klassischen Maxwell-Gleichungen sind eichinvariant,

$$\mathbf{A} \rightarrow \mathbf{A}' = \mathbf{A} + \nabla\chi \quad , \quad \phi \rightarrow \phi' = \phi - \partial_t\chi \quad . \quad (4.1)$$

Die Invarianz gilt auch in Anwesenheit von Ladungen ϱ und Strömen \mathbf{j} . Diese Eigenschaft sollte auch in der Quantenmechanik erhalten bleiben.

4.1.1 Herleitung der minimalen Kopplung

Die Bewegungsgleichung klassischer geladener Teilchen

$$m\ddot{\mathbf{x}} = q\mathbf{E} + q\dot{\mathbf{x}} \times \mathbf{B} \quad \text{Elektrische + Lorentz-Kraft}$$

kann aus der Lagrange-Funktion

$$L = \frac{1}{2}m\dot{\mathbf{x}}^2 + q\dot{\mathbf{x}}\mathbf{A}(\mathbf{x}, t) - q\phi(\mathbf{x}, t) \quad (4.2)$$

wie folgt abgeleitet werden: Der *kanonisch konjugierte Impuls* \mathbf{p} ist definiert als

$$p_i := \frac{\partial L}{\partial \dot{x}_i} \Rightarrow p_i = m\dot{x}_i + qA_i(\mathbf{x}, t) \quad (4.3)$$

In Anwesenheit eines elektromagnetischen Feldes ist der kanonisch konjugierte Impuls also verschieden vom *kinetischen Impuls* $\mathbf{\Pi} = m\dot{\mathbf{x}}$. Die Euler-Lagrange-Gleichungen lauten:

$$\frac{d}{dt}p_i = \frac{\partial L}{\partial x_i} \quad (4.4)$$

Gleichungen (4.2) und (4.3) einsetzen:

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial L}{\partial x_i} &= -q\partial_i\phi + q\dot{x}_k\partial_i A_k \\
 \frac{d}{dt}p_i &= m\ddot{x}_i + q\frac{\partial}{\partial t}A_i(\mathbf{x}(t), t) + q\frac{\partial}{\partial x_k}A_i(\mathbf{x}(t), t)\dot{x}_k \\
 \implies m\ddot{x}_i &= -q\partial_i\phi - q\partial_t A_i + q\dot{x}_k(\partial_i A_k - \partial_k A_i)
 \end{aligned} \tag{4.5}$$

verwenden $-\partial_i\phi - \partial_t A_i = E_i$ (gilt per definitionem)

$$\implies m\ddot{x}_i = qE_i + q\dot{x}_k(\partial_i A_k - \partial_k A_i) \tag{4.6}$$

nun ist aber $B_j = (\text{rot } \mathbf{A})_j = \epsilon_{jmn}\partial_m A_n$

$$\begin{aligned}
 \implies \epsilon_{ikj}B_j &= \epsilon_{ikj}\epsilon_{jmn}\partial_m A_n \\
 &= \epsilon_{jik}\epsilon_{jmn}\partial_m A_n \\
 &= (\delta_{im}\delta_{kn} - \delta_{in}\delta_{km})\partial_m A_n \\
 &= \partial_i A_k - \partial_k A_i \\
 \implies m\ddot{x}_i &= qE_i + q\dot{x}_k\epsilon_{ikj}B_j \\
 &= qE_i + q(\dot{\mathbf{x}} \times \mathbf{B})_i
 \end{aligned} \tag{4.7}$$

qed.

Mit Hilfe der Lagrange-Funktion kann man den Hamilton-Operator und die Form der Schrödinger-Gleichung herleiten: In der klassischen Mechanik lautet die Hamilton-Funktion

$$H = p_i\dot{x}_i - L$$

Sie soll mit Hilfe von $\dot{\mathbf{x}} = \frac{1}{m}(\mathbf{p} - q\mathbf{A})$ als Funktion von \mathbf{p} und \mathbf{x} ausgedrückt werden \implies

$$\begin{aligned}
 H &= p_i \frac{1}{m} (p_i - qA_i) - \frac{1}{2}m\frac{1}{m^2}(\mathbf{p} - q\mathbf{A})^2 - q\frac{1}{m}(\mathbf{p} - q\mathbf{A})\mathbf{A} + q\phi \\
 H &= \frac{1}{2m}(\mathbf{p} - q\mathbf{A})^2 + q\phi
 \end{aligned}$$

Um zur Quantenmechanik überzugehen verwendet man die kanonische Quantisierung:

$$\mathbf{x} \rightarrow \hat{\mathbf{x}} \quad ; \quad \mathbf{p} \rightarrow \hat{\mathbf{p}} \quad ; \quad [\hat{x}_i, \hat{p}_j] = \delta_{ij}$$

In der Ortsdarstellung gilt:

$$\mathbf{x} \rightarrow \hat{\mathbf{x}} \quad ; \quad \mathbf{p} \rightarrow -i\hbar\nabla$$

und somit

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} (-i\hbar\nabla - q\mathbf{A}(\hat{\mathbf{x}}, t))^2 + q\phi(\hat{\mathbf{x}}, t) \quad , \quad i\hbar\partial_t\psi(\mathbf{x}, t) = \hat{H}\psi(\mathbf{x}, t)$$

(4.8)

Dies ist die Schrödinger-Gleichung für nichtrelativistische Teilchen in einem elektromagnetischen Feld. Die Form $(\mathbf{p} - q\mathbf{A})$ wird *minimale Kopplung* genannt.

4.1.2 Eichinvarianz der minimalen Kopplung

Wendet man die Transformation (4.1) auf den Hamiltonian (4.8) an so stellt man fest, dass die Schrödinger-Gleichung nicht invariant ist:

$$\begin{aligned}\hat{H}' &= \frac{1}{2m} (-i\hbar\nabla - q\mathbf{A}(\hat{\mathbf{x}}, t) - q\nabla\chi)^2 + q\phi(\hat{\mathbf{x}}, t) - q\frac{\partial\chi}{\partial t}\psi \\ i\hbar\partial_t\psi(\mathbf{x}, t) &\neq \hat{H}\psi(\mathbf{x}, t)\end{aligned}$$

Um die Invarianz wiederherzustellen, muß auch die Wellenfunktion unitär transformiert werden:

$$\boxed{\psi' = \psi \exp(iq\chi/\hbar)} \quad (4.9)$$

Daraus folgt

$$\begin{aligned}i\hbar\partial_t\psi' &= e^{iq\chi/\hbar} \left\{ i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} - q\frac{\partial\chi}{\partial t}\psi \right\} \\ &= e^{iq\chi/\hbar} \left\{ \hat{H}\psi - q\frac{\partial\chi}{\partial t}\psi \right\} \\ &= e^{iq\chi/\hbar} \left\{ \frac{1}{2m} (-i\hbar\nabla - q\mathbf{A})^2 + q\phi \right\} \psi - q\frac{\partial\chi}{\partial t}\psi' \\ &= \left\{ \frac{1}{2m} (-i\hbar\nabla - q\mathbf{A} - q\nabla\chi)^2 + q\phi \right\} (e^{iq\chi/\hbar}\psi) - q\frac{\partial\chi}{\partial t}\psi' \\ &= \hat{H}'\psi'\end{aligned} \quad (4.10)$$

Die minimale Kopplung spielt in der Hochenergiephysik eine zentrale Rolle. Von der Grundstruktur her haben alle Fundamentalkräfte außer der Gravitation (also elektromagnetische, starke und schwache Wechselwirkung) diese Form. Beim elektromagnetischen Feld ist die Eichinvarianz auf die einfachste Art realisiert. Man nennt Sie auch U(1) Eichtheorie, da die Transformation des Zustands (4.9) einer Multiplikation mit einer Unitären $I \times I$ Matrix (= komplexe Zahl mit Betrag eins) entspricht.

Bei anderen Wechselwirkungen treten mehrere Felder auf. Beispiel: bei der sogenannten *speziell* unitären SU(2) Eichtheorie der (elektro-) schwachen Wechselwirkung werden die Zustände gemäß

$$\begin{pmatrix} \psi'_e \\ \psi'_{\nu_e} \end{pmatrix} = \exp(i\boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{\chi}) \begin{pmatrix} \psi_e \\ \psi_{\nu_e} \end{pmatrix} \quad (4.11)$$

transformiert. Hierbei ist ψ_e die Wellenfunktion des Elektrons, ψ_{ν_e} die des Elektron-Neutrinos und $\boldsymbol{\sigma}$ die Pauli-Matrizen. Das Wort *speziell* bedeutet, dass die Matrix $\exp(i\boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{\chi})$ die Determinante 1 hat. Das Eichpotential in dieser Theorie wird als $\mathbf{A} = \mathbf{A}^{(i)}\sigma_i$ geschrieben und besteht daher aus drei Vektorfeldern $\mathbf{A}^{(i)}$. Die entsprechen grob gesagt den W_{\pm} -Bosonen und dem Z-Boson, die die schwache Wechselwirkung vermitteln.¹

¹Eigentlich sind die schwache und die elektromagnetische Theorie ineinander verwoben und werden zusammen durch eine $U(1) \times SU(2)$ Eichtheorie beschrieben. Die U(1) ist dabei die der Hyperladung und nicht die, die die elektromagnetischen Felder allein beschreibt.

4.2 Die Power-Zienau-Woolley-Transformation

Obwohl sie für die Beschreibung der Fundamentalkräfte wichtig ist, hat die minimale Kopplung einige Nachteile, wenn man die Wechselwirkung von Atomen und Licht beschreiben will:

- Bei elektrisch neutralen, aus Elektronen, Neutronen und Protonen zusammengesetzten Atomen ist eine Kopplung an die Ladung der Teilchen etwas umständlich. Bequemer wäre es, die Kopplung über die Multipolmomente der Atome zu beschreiben.
- In der minimalen Kopplung treten die Eichpotentiale statt der physikalischen Felder auf. Das ist zwar kein prinzipielles Problem, aber eine Kopplung an das elektrische und das magnetische Feld wäre — unabhängig von der gewählten Eichbedingung — manifest eichinvariant.
- In der Coulomb-Eichung kann das skalare Potential ϕ durch das unretardierte Coulomb-Potential ersetzt werden, da letzteres eine Lösung der Poisson-Gleichung ist, die ϕ erfüllt. Das Coulomb-Potential ist aber unretardiert und gaukelt uns eine instantane langreichweitige Wechselwirkung zwischen den Atomen vor.

Die Power-Zienau-Woolley-Transformation (Refs. [27] und [28], siehe auch [29] und [30]) ist eine unitäre Transformation, die die minimale Kopplung in eine äquivalente Form überführt, die die obigen Probleme beseitigt.

4.2.1 Das Grundprinzip der Transformation

Zur Herleitung der Dipolkopplung² kann man von der Feststellung ausgehen, dass sich die Euler-Lagrange-Gleichungen nicht ändern, wenn man zur Lagrange-Funktion eine totale Zeitableitung addiert:

$$L'(x, \dot{x}, t) = L(x, \dot{x}, t) + \frac{d}{dt}F(x, t) \implies \frac{d}{dt} \frac{\partial L'}{\partial \dot{x}} - \frac{\partial L'}{\partial x} = \frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{x}} - \frac{\partial L}{\partial x}$$

Der Einfachheit halber betrachten wir konstante Felder \mathbf{E} und \mathbf{B} (der Beweis geht auch allgemein).

$$\begin{aligned} \mathbf{E} = \mathbf{E}_0; \mathbf{B} = \mathbf{B}_0 &\iff \phi = -\mathbf{x} \mathbf{E}_0 \\ \mathbf{A} &= -\frac{1}{2}(\mathbf{x} \times \mathbf{B}_0) \end{aligned}$$

²Besser wäre der Ausdruck *multipolare Kopplung*, da die Power-Zienau-Woolley-Transformation die minimale eigentlich in eine Kopplung überführt, die an alle Multipolmomente angreift. In der Praxis wird jedoch meist nur das Dipolmoment berücksichtigt. Bei dem einfachen Beispiel in diesem Unterabschnitt tritt ebenfalls nur das Dipolmoment auf.

Wählt man $F = -q\mathbf{x}\mathbf{A}$ so folgt

$$\frac{d}{dt}F = -q\dot{\mathbf{x}}\mathbf{A} + \frac{q}{2}(\mathbf{x} \times \dot{\mathbf{x}})\mathbf{B}_0 \quad (4.12)$$

$$L' = \underbrace{\frac{1}{2}m\dot{\mathbf{x}}^2 + q\dot{\mathbf{x}}\mathbf{A} + q\mathbf{x}\mathbf{E}_0}_{L} - q\dot{\mathbf{x}}\mathbf{A} + \frac{q}{2}(\mathbf{x} \times \dot{\mathbf{x}})\mathbf{B}_0 \quad (4.13)$$

$$= \frac{1}{2}m\dot{\mathbf{x}}^2 + q\mathbf{x}\mathbf{E}_0 + \frac{q}{2m}\mathbf{L}\mathbf{B}_0 \quad \text{mit } \mathbf{L} = (\mathbf{x} \times m\dot{\mathbf{x}}) \quad (4.14)$$

Setzt man $\mathbf{d} := q\mathbf{x}$ elektrisches Dipolmoment des Teilchens so findet man für die neue
 $\boldsymbol{\mu} := \frac{q}{2m}\mathbf{L}$ magnetisches Moment des Teilchens
 Lagrange-Funktion

$$L' = \frac{1}{2}m\dot{\mathbf{x}}^2 + \mathbf{d}\mathbf{E}_0 + \boldsymbol{\mu}\mathbf{B}_0$$

Vorteil: Jetzt gilt für den kanonisch konjugierten Impuls $\mathbf{p} = m\dot{\mathbf{x}}$. Ausserdem ist die Kopplung manifest eichinvariant und besser geeignet für elektrisch neutrale Teilchen.

4.2.2 Die vollständige Transformation

Wir betrachten eine Verteilung von Punktteilchen mit Ladung q_α am Ort \mathbf{x}_α , deren Ladungsdichte durch

$$\varrho(\mathbf{x}) = \sum_{\alpha} q_{\alpha} \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}_{\alpha}) \quad (4.15)$$

gegeben ist. Da wir insbesondere am Verhalten eines aus nicht ionisierten Atomen bestehenden Gases interessiert sind nehmen wir an, dass die Gesamtladung Null ist, $\sum_{\alpha} q_{\alpha} = 0$. Die Polarisation der makroskopischen Elektrodynamik erfüllt die Gleichung $\text{div} \mathbf{P} = -\langle \varrho_{\text{geb}} \rangle$ (Siehe Abschnitt 1.5). Für den vorliegenden Fall ist eine Lösung dieser Gleichung gegeben durch

$$\mathbf{P}(\mathbf{x}) = \sum_{\alpha} \int_0^1 du \, q_{\alpha} (\mathbf{x}_{\alpha} - \mathbf{R}) \delta(\mathbf{x} - \mathbf{R} - u(\mathbf{x}_{\alpha} - \mathbf{R})) \quad (4.16)$$

Beweis:

$$\begin{aligned} \partial_i \mathbf{P}_i(\mathbf{x}) &= \sum_{\alpha} \int_0^1 du \, q_{\alpha} (\mathbf{x}_{\alpha} - \mathbf{R})_i \partial_i \delta(\mathbf{x} - \mathbf{R} - u(\mathbf{x}_{\alpha} - \mathbf{R})) \\ &= \sum_{\alpha} \int_0^1 du \, q_{\alpha} (\mathbf{x}_{\alpha} - \mathbf{R})_i \delta'(\mathbf{x}_i - \mathbf{R}_i - u(\mathbf{x}_{\alpha} - \mathbf{R})_i) \times \\ &\quad \delta(\mathbf{x}_j - \mathbf{R}_j - u(\mathbf{x}_{\alpha} - \mathbf{R})_j) \delta(\mathbf{x}_k - \mathbf{R}_k - u(\mathbf{x}_{\alpha} - \mathbf{R})_k), \end{aligned} \quad (4.17)$$

wobei über i summiert wird und $(i, j, k) = (1, 2, 3), (2, 3, 1), (3, 1, 2)$. δ' ist die Ableitung der δ -Distribution. Nun gilt

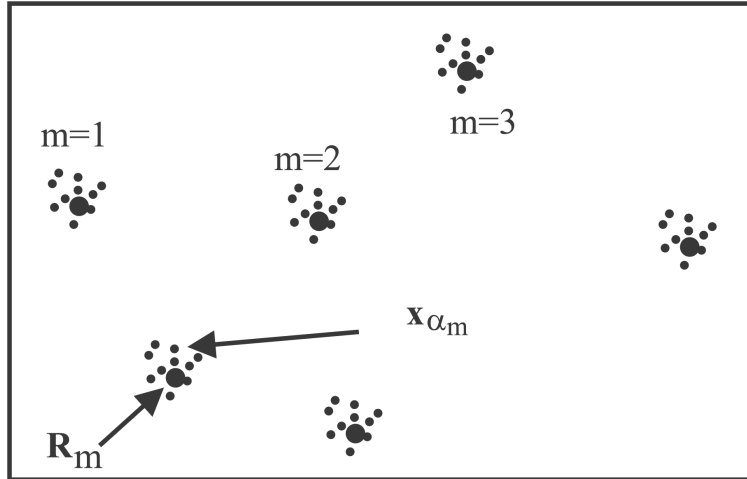
$$(\mathbf{x}_{\alpha} - \mathbf{R})_i \delta'(\mathbf{x}_i - \mathbf{R}_i - u(\mathbf{x}_{\alpha} - \mathbf{R})_i) = -\partial_u \delta(\mathbf{x}_i - \mathbf{R}_i - u(\mathbf{x}_{\alpha} - \mathbf{R})_i) \quad (4.18)$$

und somit

$$\begin{aligned}
 \partial_i \mathbf{P}_i(\mathbf{x}) &= - \sum_{\alpha} \int_0^1 du \, q_{\alpha} \partial_u \delta(\mathbf{x} - \mathbf{R} - u(\mathbf{x}_{\alpha} - \mathbf{R})) \\
 &= - \sum_{\alpha} q_{\alpha} \{ \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}_{\alpha}) - \delta(\mathbf{x} - \mathbf{R}) \} \\
 &= Q \delta(\mathbf{x} - \mathbf{R}) - \sum_{\alpha} q_{\alpha} \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}_{\alpha})
 \end{aligned} \tag{4.19}$$

Die Gesamtladung Q verschwindet für neutrale Atome und der zweite Term entspricht gerade der Ladungsverteilung q.e.d.

Um alle Konsequenzen der Power-Zienau-Woolley-Transformation verstehen zu können, muß man mehrere Atome/Moleküle im Gas berücksichtigen. Wir stellen uns also eine Ladungsverteilung vor, bei der die Ladungsträger zu elektrisch neutralen Atomen gruppiert sind. Das m te Atom hat die Kern-Koordinate \mathbf{R}_m und die Teilchen-Koordinaten (Elektronen + Kern) \mathbf{x}_{α_m} .



Der vollständige Hamiltonian dieses Systems in der minimalen Kopplung ist gegeben durch

$$\begin{aligned}
 H &= \sum_m \sum_{\alpha_m} \frac{1}{2M_{\alpha_m}} (\mathbf{p}_{\alpha_m} - q_{\alpha_m} \mathbf{A}(\mathbf{x}_{\alpha_m}))^2 + \frac{\varepsilon_0}{2} \int d^3x ((\mathbf{E}^{\perp})^2 + c^2 \mathbf{B}^2) + \\
 &\quad \sum_{m < m'} V_{\text{Coul}}(m, m') + \sum_m V_{\text{Coul}}(m)
 \end{aligned} \tag{4.20}$$

\mathbf{E}^{\perp} ist dabei der Operator des transversalen elektrischen Feldes, den wir bisher (in Abwesenheit von Ladungen) einfach als \mathbf{E} bezeichnet haben. Das gesamte elektrische Feld in Anwesenheit von Ladungen nimmt die Form $\mathbf{E} = \mathbf{E}^{\perp} - \nabla V_{\text{Coul}}(\mathbf{x})$ an. Die Coulomb-Wechselwirkung der Teilchen innerhalb eines Atoms ist gegeben durch

$$V_{\text{Coul}}(m) = \sum_{\alpha_m < \beta_m} \frac{q_{\alpha_m} q_{\beta_m}}{4\pi\varepsilon_0 |\mathbf{x}_{\alpha_m} - \mathbf{x}_{\beta_m}|} \tag{4.21}$$

während die inter-atomare Coulomb-Wechselwirkung die Form

$$V_{\text{Coul}}(m, m') = \sum_{\alpha_m, \beta_{m'}} \frac{q_{\alpha_m} q_{\beta_{m'}}}{4\pi\epsilon_0 |\mathbf{x}_{\alpha_m} - \mathbf{x}_{\beta_{m'}}|} \quad (4.22)$$

annimmt.

Um die unitäre Transformation zwischen minimaler und multipolarer Kopplung zu konstruieren, setzen wir die Gesamtpolarisation aus derjenigen der einzelnen Atome zusammen,

$$\mathbf{P}(\mathbf{x}) = \sum_m \mathbf{P}_m(\mathbf{x}) \quad (4.23)$$

$$\mathbf{P}_m(\mathbf{x}) = \sum_{\alpha_m} \int_0^1 du \, q_{\alpha_m} (\mathbf{x}_{\alpha_m} - \mathbf{R}_m) \delta(\mathbf{x} - \mathbf{R}_m - u(\mathbf{x}_{\alpha_m} - \mathbf{R}_m)) . \quad (4.24)$$

Die *Power-Zienau-Woolley-Transformation* ist dann gegeben durch

$$U = \exp \left(\frac{i}{\hbar} \int d^3x \, \mathbf{P}(\mathbf{x}) \cdot \mathbf{A}(\mathbf{x}) \right) \quad (4.25)$$

Berechnung der Transformation

Unsere Aufgabe besteht nun darin, das Verhalten des Hamiltonians und der anderen Operatoren unter dieser Transformation zu untersuchen. Da U eine Funktion von \mathbf{x}_{α_m} und $\mathbf{A}(\mathbf{x})$ ist, ist es offensichtlich, dass wegen $[\mathbf{A}_i(\mathbf{x}), \mathbf{A}_j(\mathbf{x}')] = [\mathbf{A}_i(\mathbf{x}), \mathbf{B}_j(\mathbf{x}')] = 0$ das Vektorpotential, das magnetische Feld sowie die Teilchen-Koordinaten und die Polarisation sich trivial transformieren:

$$\tilde{\mathbf{A}} = U^\dagger \mathbf{A} U = \mathbf{A} \quad (4.26)$$

$$\tilde{\mathbf{B}} = \mathbf{B} \quad (4.27)$$

$$\tilde{\mathbf{x}}_{\alpha_m} = \mathbf{x}_{\alpha_m} \quad (4.28)$$

$$\tilde{\mathbf{P}} = \mathbf{P} \quad (4.29)$$

Alle anderen Felder lassen sich mit Hilfe des Theorems $\exp(-iS)E \exp(iS) = E - i[S, E] + \dots$ leicht berechnen. Für das elektrische Feld folgt

$$\tilde{\mathbf{E}}_i^\perp(\mathbf{x}) = \mathbf{E}_i^\perp(\mathbf{x}) - \frac{i}{\hbar} \int d^3x' \, \mathbf{P}_j(\mathbf{x}') [\mathbf{A}_j(\mathbf{x}'), \mathbf{E}_i^\perp(\mathbf{x})] \quad (4.30)$$

$$= \mathbf{E}_i^\perp(\mathbf{x}) - \frac{i}{\hbar} \int d^3x' \, \mathbf{P}_j(\mathbf{x}') \frac{-i\hbar}{\epsilon_0} \delta_{ij}^\perp(\mathbf{x} - \mathbf{x}') . \quad (4.31)$$

Erinnert man sich daran, dass der transversale (quellenfreie) Anteil eines Vektorfeldes \mathbf{P} durch $(T\mathbf{P})_i(\mathbf{x}) = \int d^3x' \, \mathbf{P}_j(\mathbf{x}') \delta_{ij}^\perp(\mathbf{x} - \mathbf{x}')$ gewonnen werden kann, so folgt

$$\tilde{\mathbf{E}}^\perp(\mathbf{x}) = \mathbf{E}^\perp(\mathbf{x}) - \frac{1}{\epsilon_0} \mathbf{P}^\perp(\mathbf{x}) . \quad (4.32)$$

Diese Gleichung hat überraschende Konsequenzen. Schreibt man sie nämlich in der Form

$$\varepsilon_0 \mathbf{E}^\perp(\mathbf{x}) = \varepsilon_0 \tilde{\mathbf{E}}^\perp(\mathbf{x}) + \tilde{\mathbf{P}}^\perp(\mathbf{x}) = \tilde{\mathbf{D}}^\perp \quad (4.33)$$

so sieht man, dass der *alte* Operator $\varepsilon_0 \mathbf{E}^\perp$ des elektrischen Feldes *im neuen Bild* die Rolle der dielektrischen Verschiebungsdichte $\tilde{\mathbf{D}}^\perp$ übernimmt. Oder anders ausgedrückt: benutzt man die minimale Kopplung, so wird das elektrische Feld durch \mathbf{E}^\perp und die dielektrische Verschiebungsdichte durch $\varepsilon_0 \mathbf{E}^\perp + \mathbf{P}^\perp$ beschrieben. Benutzt man die Dipolkopplung, so ist das elektrische Feld durch $\tilde{\mathbf{E}}^\perp$ und die dielektrische Verschiebungsdichte durch $\varepsilon_0 \tilde{\mathbf{E}}^\perp + \tilde{\mathbf{P}}^\perp = \varepsilon_0 \mathbf{E}^\perp$ gegeben. Wegen der einfachen Form des Operators \mathbf{E}^\perp verwendet man auch bei der multipolaren Kopplung diesen Operator an Stelle des eigentlichen Feldes. Man beschreibt die Wechselwirkung also über die dielektrische Verschiebungsdichte.

Es bleibt, die Transformation der Teilchenimpulse zu berechnen. In derselben Weise wie beim elektrischen Feld findet man

$$\begin{aligned} \tilde{\mathbf{p}}_{\alpha_m} &= \mathbf{p}_{\alpha_m} - i[S, \mathbf{p}_{\alpha_m}] + \dots \\ &= \mathbf{p}_{\alpha_m} + \hbar \nabla_{\alpha_m} S. \end{aligned} \quad (4.34)$$

Die Berechnung des Gradienten werden wir weiter unten behandeln. Insgesamt ergibt sich damit für den transformierten Hamiltonian

$$\begin{aligned} \tilde{H} &= \sum_m \sum_{\alpha_m} \frac{1}{2M_{\alpha_m}} (\mathbf{p}_{\alpha_m} + \hbar \nabla_{\alpha_m} S - q_{\alpha_m} \mathbf{A}(\mathbf{x}_{\alpha_m}))^2 \\ &\quad + \frac{\varepsilon_0}{2} \int d^3x \left(\frac{1}{\varepsilon_0^2} (\tilde{\mathbf{D}}^\perp - \mathbf{P}^\perp)^2 + c^2 \mathbf{B}^2 \right) + \\ &\quad \sum_{m < m'} V_{\text{Coul}}(m, m') + \sum_m V_{\text{Coul}}(m) \end{aligned} \quad (4.35)$$

Berechnung der Polarisations-Integrale

Dieser Ausdruck läßt sich noch erheblich vereinfachen. Formen wir zunächst die zweite Zeile um:

$$\begin{aligned} \frac{1}{2\varepsilon_0} \int d^3x (\tilde{\mathbf{D}}^\perp - \mathbf{P}^\perp)^2 &= \frac{1}{2\varepsilon_0} \int d^3x \left((\tilde{\mathbf{D}}^\perp)^2 - 2\tilde{\mathbf{D}}^\perp \cdot \mathbf{P}^\perp + (\mathbf{P}^\perp)^2 \right) \\ &= \frac{1}{2\varepsilon_0} \int d^3x \left((\tilde{\mathbf{D}}^\perp)^2 - 2\tilde{\mathbf{D}}^\perp \cdot \mathbf{P}^\perp + (\mathbf{P} - \mathbf{P}^\parallel)^2 \right) \end{aligned} \quad (4.36)$$

wobei \mathbf{P}^\parallel der longitudinale Anteil des Vektorfeldes ist (d.h. die Fourier-Transformierte des Feldes ist parallel zum Wellenvektor und nicht transversal dazu). Man kann nun die folgende Relation verwenden,

$$\int d^3x \mathbf{R}^\perp(\mathbf{x}) \cdot \mathbf{S}(\mathbf{x}) = \int d^3x \mathbf{R}^\perp(\mathbf{x}) \cdot \mathbf{S}^\perp(\mathbf{x}). \quad (4.37)$$

Zum Beweis zeigt man zuerst, dass der Transversalisierungs-Operator idempotent ist. Per Definition gilt

$$(T^2 R)_i(\mathbf{x}) = \int d^3 x' \delta_{ij}^\perp(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \int d^3 x'' \delta_{jk}^\perp(\mathbf{x}' - \mathbf{x}'') \mathbf{R}_k(\mathbf{x}'') \quad (4.38)$$

Mit

$$\begin{aligned} \int d^3 x' \delta_{ij}^\perp(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \delta_{jk}^\perp(\mathbf{x}' - \mathbf{x}'') &= \int d^3 x' \int \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} \frac{d^3 k'}{(2\pi)^3} e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{x} - \mathbf{x}')} e^{i\mathbf{k}' \cdot (\mathbf{x}' - \mathbf{x}'')} \times \\ &\quad \left(\delta_{ij} - \frac{\mathbf{k}_i \mathbf{k}_j}{\mathbf{k}^2} \right) \left(\delta_{jk} - \frac{\mathbf{k}'_j \mathbf{k}'_k}{(\mathbf{k}')^2} \right) \\ &= \int \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{x} - \mathbf{x}'')} \left(\delta_{ij} - \frac{\mathbf{k}_i \mathbf{k}_j}{\mathbf{k}^2} \right) \left(\delta_{jk} - \frac{\mathbf{k}_j \mathbf{k}_k}{\mathbf{k}^2} \right) \\ &= \delta_{ik}^\perp(\mathbf{x} - \mathbf{x}'') \end{aligned} \quad (4.39)$$

ergibt sich

$$\begin{aligned} (T^2 R)_i(\mathbf{x}) &= \int d^3 x'' \delta_{ik}^\perp(\mathbf{x} - \mathbf{x}'') \mathbf{R}_k(\mathbf{x}'') \\ &= (TR)_i(\mathbf{x}) \end{aligned} \quad (4.40)$$

Ausserdem ist T hermitesch bezüglich des Standard-Skalarprodukts:

$$\begin{aligned} \int d^3 x \mathbf{R}(\mathbf{x}) \cdot (T\mathbf{S})(\mathbf{x}) &= \int d^3 x \mathbf{R}_i(\mathbf{x}) \int d^3 x' \delta_{ij}^\perp(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \mathbf{S}_j(\mathbf{x}') \\ &= \int d^3 x' (T\mathbf{R})(\mathbf{x}') \cdot \mathbf{S}(\mathbf{x}') \end{aligned} \quad (4.41)$$

Die Behauptung (4.37) folgt dann aus

$$\begin{aligned} \int d^3 x \mathbf{R}^\perp(\mathbf{x}) \cdot \mathbf{S}(\mathbf{x}) &= \int d^3 x (T\mathbf{R})(\mathbf{x}) \cdot \mathbf{S}(\mathbf{x}) \\ &= \int d^3 x (T^2 \mathbf{R})(\mathbf{x}) \cdot \mathbf{S}(\mathbf{x}) \\ &= \int d^3 x (T\mathbf{R})(\mathbf{x}) \cdot (T\mathbf{S})(\mathbf{x}) \\ &= \int d^3 x \mathbf{R}^\perp(\mathbf{x}) \cdot \mathbf{S}^\perp(\mathbf{x}) . \end{aligned} \quad (4.42)$$

Die Relation (4.37) hilft uns dabei, das Integral über die Polarisation umzuformen:

$$\begin{aligned} \frac{1}{2\varepsilon_0} \int d^3 x \left(\mathbf{P}^2 - 2\mathbf{P} \cdot \mathbf{P}^\parallel + (\mathbf{P}^\parallel)^2 \right) &= \frac{1}{2\varepsilon_0} \int d^3 x \left(\mathbf{P}^2 - 2(\mathbf{P}^\parallel)^2 + (\mathbf{P}^\parallel)^2 \right) \\ &= \frac{1}{2\varepsilon_0} \int d^3 x \left(\mathbf{P}^2 - (\mathbf{P}^\parallel)^2 \right) \end{aligned} \quad (4.43)$$

Das Integral über den longitudinalen Anteil kann exakt berechnet werden. Da die Quelle für diesen Term die Ladungsverteilung ist, $\text{div} \mathbf{P} = \text{div} \mathbf{P}^{\parallel} = -\varrho$, kann man erwarten, dass er etwas mit dem Coulomb-Potential zu tun hat. Formen wir dieses zunächst um:

$$\begin{aligned} V_{\text{Coul}}(\mathbf{x}) &= \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \int d^3x' \frac{\varrho(\mathbf{x}')}{|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|} \\ &= \frac{-1}{4\pi\epsilon_0} \int d^3x' \frac{\text{div} \mathbf{P}^{\parallel}(\mathbf{x}')}{|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|} \\ &= \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \int d^3x' \mathbf{P}_i^{\parallel}(\mathbf{x}') \partial'_i \frac{1}{|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|} \end{aligned} \quad (4.44)$$

Für den Gradienten des Coulomb-Potentials, der ja das negative longitudinale elektrische Feld ist, ergibt sich

$$\begin{aligned} \partial_j V_{\text{Coul}}(\mathbf{x}) &= \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \int d^3x' \mathbf{P}_i^{\parallel}(\mathbf{x}') \partial_j \partial'_i \frac{1}{|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|} \\ &= \frac{-1}{4\pi\epsilon_0} \int d^3x' \mathbf{P}_i^{\parallel}(\mathbf{x}') \partial_j \partial'_i \frac{1}{|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|} \end{aligned} \quad (4.45)$$

Um die doppelte Ableitung im Integranden zu berechnen, verwendet man am besten die Fourier-Transformation:

$$\int d^3x \frac{e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}}}{|\mathbf{x}|} = \frac{4\pi}{\mathbf{k}^2} \quad (4.46)$$

Zum Beweis geht man zu Kugelkoordinaten über und wählt die z-Achse in Richtung von \mathbf{k} . Man findet dann ³

$$\begin{aligned} \int d^3x \frac{e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}}}{|\mathbf{x}|} &= \int_0^\infty r^2 dr \int d\cos\vartheta \int d\varphi \frac{e^{-ikr\cos\vartheta}}{r} \\ &= 2\pi \int_0^\infty r dr \frac{1}{-ikr} (e^{-ikr} - e^{ikr}) \\ &= \frac{2\pi i}{k} \left\{ \pi\delta(k) - i\frac{\mathcal{P}}{k} - \left(\pi\delta(k) + i\frac{\mathcal{P}}{k} \right) \right\} \\ &= \frac{4\pi}{\mathbf{k}^2} \end{aligned} \quad (4.47)$$

³Die Unterdrückung des Hauptwertes \mathcal{P} in der letzten Zeile hat folgenden Hintergrund: Wie jede Distribution ist auch \mathcal{P}/k nur als Integrand zusammen mit einer Testfunktion (unendlich oft differenzierbar, endliche Norm, keine Pole) definiert. Nun taucht in der vorletzten Zeile aber noch ein zusätzlicher Faktor $1/k$ auf, der keine Testfunktion ist. Das Ergebnis ist also höchstens dann noch sauber definiert, wenn man es mit einer Testfunktion multipliziert, die linear mit k gegen Null geht. Es ist in der theoretischen Physik jedoch üblich, diese Gleichung einfach unsauber (ohne Angabe von Testfunktionen) weiter zu verwenden. Der Hauptwert macht dann keinen Sinn mehr, da er bei einer Singularität der Form $1/k^2$ nicht mehr zur Aufhebung der divergierenden Terme führt. Man lässt ihn daher einfach weg.

Damit folgt für die doppelte Ableitung

$$\begin{aligned}
 \partial_j \partial_i \frac{1}{|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|} &= \partial_j \partial_i \int \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} \frac{4\pi e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{x} - \mathbf{x}')}}{k^2} \\
 &= -4\pi \int \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{x} - \mathbf{x}')} \frac{k_i k_j}{k^2} \\
 &= -4\pi (\delta_{ij} \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}') - \delta_{ij}^\perp(\mathbf{x} - \mathbf{x}'))
 \end{aligned} \tag{4.48}$$

und somit

$$\begin{aligned}
 \partial_j V_{\text{Coul}}(\mathbf{x}) &= \frac{-1}{4\pi\epsilon_0} \int d^3 x' \mathbf{P}_i^\parallel(\mathbf{x}') (-4\pi) (\delta_{ij} \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}') - \delta_{ij}^\perp(\mathbf{x} - \mathbf{x}')) \\
 &= \frac{1}{\epsilon_0} \mathbf{P}_j^\parallel(\mathbf{x})
 \end{aligned} \tag{4.49}$$

Das longitudinale elektrische Feld ist also vollständig durch den Polarisationsanteil gegeben.

Dieser Zusammenhang führt zu

$$\begin{aligned}
 -\frac{1}{2\epsilon_0} \int d^3 x (\mathbf{P}^\parallel)^2 &= -\frac{\epsilon_0}{2} \int d^3 x (\nabla V_{\text{Coul}})^2 \\
 &= \frac{\epsilon_0}{2} \int d^3 x V_{\text{Coul}} \Delta V_{\text{Coul}} \\
 &= -\frac{1}{2} \int d^3 x V_{\text{Coul}} \varrho,
 \end{aligned} \tag{4.50}$$

wobei die letzte Zeile daraus folgt, dass das Coulomb-Potential die Poisson-Gleichung erfüllt. Setzt man Gleichung (4.15) für die Ladungsdichte ein, so findet man

$$-\frac{1}{2\epsilon_0} \int d^3 x (\mathbf{P}^\parallel)^2 = -\frac{1}{2} \sum_{m, \alpha_m} \sum_{m', \alpha'_{m'}} \frac{q_{\alpha_m} q_{\alpha'_{m'}}}{4\pi\epsilon_0 |\mathbf{x}_{\alpha_m} - \mathbf{x}_{\alpha'_{m'}}|} \tag{4.51}$$

In diesem Ausdruck muß man die Terme für gleiche Teilchen weglassen, da sie divergieren. Der Rest ist symmetrisch unter Vertauschen der ungestrichenen und der gestrichenen Indizes, so dass

$$\begin{aligned}
 -\frac{1}{2\epsilon_0} \int d^3 x (\mathbf{P}^\parallel)^2 &= -\sum_{m < m'} \sum_{\alpha_m, \alpha'_{m'}} \frac{q_{\alpha_m} q_{\alpha'_{m'}}}{4\pi\epsilon_0 |\mathbf{x}_{\alpha_m} - \mathbf{x}_{\alpha'_{m'}}|} \\
 &\quad -\sum_m \sum_{\alpha_m < \alpha'_m} \frac{q_{\alpha_m} q_{\alpha'_m}}{4\pi\epsilon_0 |\mathbf{x}_{\alpha_m} - \mathbf{x}_{\alpha'_m}|} \\
 &= -\sum_{m < m'} V(m, m') - \sum_m V(m)
 \end{aligned} \tag{4.52}$$

Das Integral über den longitudinalen Anteil der Polarisation hebt also genau die Coulomb-Wechselwirkung zwischen den Atomen auf. Dies ist der Grund, warum es in Gl. (4.36) sinnvoll

war, die transversale Polarisation in die vollständige und die longitudinale Polarisation zu zerlegen. Das verbleibende Integral über die volle Polarisation zerlegen wir in die Einzelbeiträge der Atome:

$$\int d^3x \mathbf{P}^2 = \sum_{m,m'} \int d^3x \mathbf{P}_m \mathbf{P}_{m'} \quad (4.53)$$

Aus Gl. (4.24) kann man ersehen, dass die Polarisation des m ten Atoms stark auf den Bereich des Atoms lokalisiert ist. Da im Gaszustand der Abstand zwischen den Atomen sehr viel größer als ihre Ausdehnung ist, kann man die Terme mit $m \neq m'$ vernachlässigen und erhält

$$\begin{aligned} \frac{1}{2\varepsilon_0} \int d^3x \mathbf{P}^2 &\approx \frac{1}{2\varepsilon_0} \sum_m \int d^3x \mathbf{P}_m^2 \\ &= \frac{1}{2\varepsilon_0} \sum_m \int d^3x \left((\mathbf{P}_m^\perp)^2 + (\mathbf{P}_m^\parallel)^2 \right) \\ &= \frac{1}{2\varepsilon_0} \sum_m \int d^3x (\mathbf{P}_m^\perp)^2 + \sum_m V(m) \end{aligned} \quad (4.54)$$

Hamiltonian und multipolare Entwicklung

Setzt man alle Umformungen in den transformierten Hamiltonian (4.35) ein, so gelangt man zu

$$\tilde{H} = \sum_m H_m + H_{\text{rad}} + H_{\text{int}} \quad (4.55)$$

$$H_m = \sum_{\alpha_m} \frac{\mathbf{p}_{\alpha_m}^2}{2M_{\alpha_m}} + V(m) + \frac{1}{2\varepsilon_0} \int d^3x (\mathbf{P}_m^\perp)^2 \quad (4.56)$$

$$H_{\text{rad}} = \frac{1}{2\varepsilon_0} \int d^3x (\mathbf{D}^\perp)^2 + \frac{1}{2\mu_0} \int d^3x \mathbf{B}^2 \quad (4.57)$$

$$\begin{aligned} H_{\text{int}} &= -\frac{1}{\varepsilon_0} \int d^3x \mathbf{D}^\perp \cdot \mathbf{P} \\ &\quad + \sum_{m,\alpha_m} \frac{1}{2M_{\alpha_m}} (\mathbf{n}_{\alpha_m} \cdot \mathbf{p}_{\alpha_m} + \mathbf{p}_{\alpha_m} \cdot \mathbf{n}_{\alpha_m} + (\mathbf{n}_{\alpha_m})^2) \end{aligned} \quad (4.58)$$

mit

$$\begin{aligned} (\mathbf{n}_{\alpha_m})_i &:= \hbar(\nabla_{\alpha_m})_i S - q_{\alpha_m} \mathbf{A}_i(\mathbf{x}_{\alpha_m}) \\ &= \hbar(\nabla_{\alpha_m})_i \int_0^1 du q_{\alpha_m} (\mathbf{x}_{\alpha_m} - \mathbf{R}_m) \cdot \mathbf{A}(\mathbf{R}_m + u(\mathbf{x}_{\alpha_m} - \mathbf{R}_m)) - q_{\alpha_m} \mathbf{A}_i(\mathbf{x}_{\alpha_m}) \\ &= \int_0^1 du q_{\alpha_m} \left(\mathbf{A}_i(\mathbf{R}_m + u(\mathbf{x}_{\alpha_m} - \mathbf{R}_m)) \right. \\ &\quad \left. + (\mathbf{x}_{\alpha_m} - \mathbf{R}_m)_j u \partial_j \mathbf{A}_i(\mathbf{R}_m + u(\mathbf{x}_{\alpha_m} - \mathbf{R}_m)) \right) - q_{\alpha_m} \mathbf{A}_i(\mathbf{x}_{\alpha_m}) \end{aligned} \quad (4.59)$$

Der Vektor \mathbf{n}_{α_m} kann in eine explizit potential-unabhngige Form gebracht werden, wenn man die mittels partieller Integration beweisbare Gleichung

$$\int_0^1 du u \partial_u \mathbf{A}(\mathbf{R}_m + u(\mathbf{x}_{\alpha_m} - \mathbf{R}_m)) = \mathbf{A}(\mathbf{x}_{\alpha_m}) - \int_0^1 du \mathbf{A}(\mathbf{R}_m + u(\mathbf{x}_{\alpha_m} - \mathbf{R}_m)) \quad (4.60)$$

verwendet. Mit der Abkrzung $\mathbf{r}_{\alpha_m} := \mathbf{x}_{\alpha_m} - \mathbf{R}_m$ folgt

$$\begin{aligned} (\mathbf{n}_{\alpha_m})_i &:= \int_0^1 du q_{\alpha_m} (\mathbf{A}_i(\mathbf{R}_m + u\mathbf{r}_{\alpha_m}) + (\mathbf{r}_{\alpha_m})_j u \partial_i \mathbf{A}_j(\mathbf{R}_m + u\mathbf{r}_{\alpha_m})) \\ &\quad - \int_0^1 du q_{\alpha_m} (u \partial_u \mathbf{A}_i(\mathbf{R}_m + u\mathbf{r}_{\alpha_m}) + \mathbf{A}_i(\mathbf{R}_m + u\mathbf{r}_{\alpha_m})) \\ &= \int_0^1 du q_{\alpha_m} ((\mathbf{r}_{\alpha_m})_j u \partial_i \mathbf{A}_j(\mathbf{R}_m + u\mathbf{r}_{\alpha_m}) - u (\mathbf{r}_{\alpha_m})_j \partial_j \mathbf{A}_i(\mathbf{R}_m + u\mathbf{r}_{\alpha_m})) \\ &= \int_0^1 du q_{\alpha_m} u (\mathbf{r}_{\alpha_m})_j (\partial_i \mathbf{A}_j(\mathbf{R}_m + u\mathbf{r}_{\alpha_m}) - \partial_j \mathbf{A}_i(\mathbf{R}_m + u\mathbf{r}_{\alpha_m})) \end{aligned} \quad (4.61)$$

und somit wegen $\partial_i \mathbf{A}_j - \partial_j \mathbf{A}_i = \varepsilon_{ijk} \mathbf{B}_k$

$$\mathbf{n}_{\alpha_m} = q_{\alpha_m} \int_0^1 u du (\mathbf{x}_{\alpha_m} - \mathbf{R}_m) \times \mathbf{B}(\mathbf{R}_m + u(\mathbf{x}_{\alpha_m} - \mathbf{R}_m)) \quad (4.62)$$

Damit sind wir bei der endgltigen Form des multipolaren Hamiltonians angelangt. Es sollte noch einmal betont werden, dass abgesehen von der Annahme, dass die vollen Polarisationen zweier Molekle einen geringen berlapp haben, keine Nherungen in die Herleitung eingegangen sind. Man kann also genauso gut diesen Hamiltonian wie auch die minimale Kopplung verwenden. Die wichtigsten Eigenschaften des Hamiltonians (4.55) sind

- explizite Eichinvarianz, da nur noch das elektrische und das magnetische Feld auftreten,
- das Coulomb-Potential zwischen verschiedenen Atomen ist verschwunden. Die Wechselwirkung zwischen den Atomen wird nun ausschlielich ber die retardierten dynamischen Felder $\tilde{\mathbf{D}}^\perp$ und \mathbf{B} vermittelt.

4.3 Dipolnherung und Dipolkopplung

Da die typische Lngenskala r von Atomen der Bohrsche Radius ($\approx 0.5 \times 10^{-10}$ m) ist, die Wellenlnge $\lambda = 2\pi/k$ des Lichts aber im Bereich von einigen 100 nm liegt, kann man den multipolaren Wechselwirkungs-Hamiltonian schon nach wenigen Gliedern abbrechen. Die Begrndung baut darauf auf, dass in diesem Fall die Multipolmomente l ter Ordnung proportional zu $(kr)^l$ sind und $kr \ll 1$ gilt, siehe Gl. (1.15). Man kann sich daher auf die niedrigsten Terme

beschränken und erhält für die Polarisation

$$\begin{aligned}
P(\mathbf{x}) &= \sum_m P_m(\mathbf{x}) \\
&= \sum_m \sum_{\alpha_m} q_{\alpha_m} (\mathbf{x}_{\alpha_m} - \mathbf{R}_m) \int_0^1 du \delta(\mathbf{x} - \mathbf{R}_m - u(\mathbf{x}_{\alpha_m} - \mathbf{R}_m)) \\
&\approx \sum_m \sum_{\alpha_m} q_{\alpha_m} (\mathbf{x}_{\alpha_m} - \mathbf{R}_m) \int_0^1 du \delta(\mathbf{x} - \mathbf{R}_m) + O(|\mathbf{x}_{\alpha_m} - \mathbf{R}_m|^2) \\
&= \sum_m \delta(\mathbf{x} - \mathbf{R}_m) \sum_{\alpha_m} q_{\alpha_m} (\mathbf{x}_{\alpha_m} - \mathbf{R}_m) \\
&= \sum_m \delta(\mathbf{x} - \mathbf{R}_m) \mathbf{d}_m, \tag{4.63}
\end{aligned}$$

wobei \mathbf{d}_m das Dipolmoment des m ten Moleküls ist. Analog findet man für den zweiten Kopplungsterm

$$\mathbf{n}_{\alpha_m} \approx q_{\alpha_m} \int_0^1 u du (\mathbf{x}_{\alpha_m} - \mathbf{R}_m) \times \mathbf{B}(\mathbf{R}_m) + O(|\mathbf{x}_{\alpha_m} - \mathbf{R}_m|^2) \tag{4.64}$$

und somit

$$\begin{aligned}
\mathbf{n}_{\alpha_m} \cdot \mathbf{p}_{\alpha_m} + \mathbf{p}_{\alpha_m} \cdot \mathbf{n}_{\alpha_m} + (\mathbf{n}_{\alpha_m})^2 &\approx 2q_{\alpha_m} \mathbf{p}_{\alpha_m} \cdot \int_0^1 u du (\mathbf{x}_{\alpha_m} - \mathbf{R}_m) \times \mathbf{B}(\mathbf{R}_m) \\
&= -q_{\alpha_m} \mathbf{L}_{\alpha_m} \cdot \mathbf{B}(\mathbf{R}_m) \tag{4.65}
\end{aligned}$$

In dieser *Dipol-Näherung* erhalten wir als Hamiltonian die sogenannte *Dipolkopplung*

$$\boxed{\tilde{H}_{\text{int}} = -\frac{1}{\varepsilon_0} \sum_m \mathbf{d}_m \cdot \tilde{\mathbf{D}}^\perp(\mathbf{R}_m) - \sum_m \boldsymbol{\mu}_m \cdot \mathbf{B}(\mathbf{R}_m)} \tag{4.66}$$

wobei $\boldsymbol{\mu}_m = \sum_{\alpha_m} q_{\alpha_m} \mathbf{L}_{\alpha_m} / (2M_{\alpha_m})$ das mit dem Bahndrehimpuls verbundene magnetische Dipolmoment ist. Dass der Spin-Anteil hier nicht auftritt liegt allein daran, dass wir ihn bei der Behandlung nicht mit einbezogen haben.

Es muß betont werden, dass nur die vollständige multipolare Wechselwirkung und die minimale Kopplung unitär äquivalent sind. Sobald man Näherungen einführt, führen die unterschiedlichen Kopplungen zu leicht unterschiedlichen Ergebnissen. Wir werden ein Beispiel dafür im nächsten Kapitel sehen. In der Quantenoptik führt dabei in der Regel die Dipolkopplung zu den etwas besseren Resultaten.

4.4 Auswahlregeln für Atome

Eine der wichtigsten Fragen in der Atomphysik und Quantenoptik ist, welche Niveaus durch das elektromagnetische Feld gekoppelt werden. Um dies zu untersuchen, betrachten wir ein einzelnes

Atom, dessen Kern am Ursprung des Koordinatensystems ruht ($\mathbf{R}_m = 0$, die Schwerpunktbewegung ist für die Auswahlregeln in sehr guter Näherung unerheblich). Da alle anderen Teilchen Elektronen sind, reduziert sich das elektrische Dipolmoment auf

$$\begin{aligned} \mathbf{d}_m &= \sum_{\alpha_m} q_{\alpha_m} (\mathbf{x}_{\alpha_m} - \mathbf{R}_m) \\ &= -e \sum_{\alpha_m} \mathbf{x}_{\alpha_m} \\ &=: -e\mathbf{r} \end{aligned} \quad (4.67)$$

\mathbf{r} ist die Summe der Elektronenkoordinaten relativ zum Kern. Im Folgenden werden wir den Index m unterdrücken, da wir nur noch ein einzelnes Molekül betrachten, $\mathbf{d}_m \rightarrow \mathbf{d}$, $\alpha_m \rightarrow \alpha$ usw., wobei die Summe nur noch über die Elektronen laufen soll und eventuelle Kernbeiträge explizit addiert werden.

In Kapitel 3 haben wir gesehen, dass die atomaren Zustände in guter Näherung Eigenzustände des Gesamtdrehimpulses

$$\mathbf{F} = \mathbf{s}_K + \sum_{\alpha} (\mathbf{L}_{\alpha} + \mathbf{s}_{\alpha}) \quad (4.68)$$

sind, $|\psi\rangle = |F, m_F, \dots\rangle$. Da die Wechselwirkung über das Dipolmoment vermittelt wird, sind die Übergangsamplituden zwischen $|F, m_F\rangle$ und $|F', m'_F\rangle$ proportional zu

$$\mathbf{d}_{F, m_F; F', m'_F} := \langle F, m_F | -e\mathbf{r} | F', m'_F \rangle . \quad (4.69)$$

Die Berechnung dieser Matrixelemente läßt sich erstaunlich elegant und einfach bewerkstelligen, wenn man das Konzept der *Vektor-Operatoren* (i.a. Tensor-Operatoren) verwendet.

Ein Vektor-Operator \mathbf{R} bezüglich eines Drehimpulses \mathbf{L} ist definiert als ein Operator, der die folgenden Kommutator-Relationen erfüllt:

$$\begin{aligned} [L_+, R_+] &= 0 \\ [L_-, R_-] &= 0 \\ [L_+, R_-] &= 2\hbar R_z \\ [L_-, R_+] &= -2\hbar R_z \\ [L_z, R_{\pm}] &= \pm\hbar R_{\pm} \\ [L_{\pm}, R_z] &= \mp\hbar R_{\pm} \end{aligned} \quad (4.70)$$

Hierbei ist $L_{\pm} = L_x \pm iL_y$ und $R_{\pm} = R_x \pm iR_y$. Äquivalent dazu sind die Relationen

$$[L_a, R_b] = i\hbar \varepsilon_{abc} R_c . \quad (4.71)$$

Ein Beispiel für einen Vektoroperator ist der Ortsoperator eines Schrödinger-Teilchens, wenn \mathbf{L} der Bahndrehimpuls ist. Es ist jedoch auch einfach zu zeigen, dass das Dipolmoment \mathbf{d} ein

Vektor-Operator ist:

$$\begin{aligned}
 [\mathbf{F}_a, \mathbf{d}_b] &= [(\mathbf{s}_K)_a + \sum_{\alpha} (\mathbf{L}_{\alpha} + \mathbf{s}_{\alpha})_a, -e \sum_{\beta} (\mathbf{x}_{\beta})_b] \\
 &= -e \sum_{\alpha, \beta} [(\mathbf{L}_{\alpha})_a, (\mathbf{x}_{\beta})_b] \\
 &= -e \sum_{\alpha, \beta} \delta_{\alpha\beta} i\hbar \varepsilon_{abc} (\mathbf{x}_{\beta})_c \\
 &= -ie\hbar \varepsilon_{abc} \sum_{\alpha} (\mathbf{x}_{\alpha})_c \\
 &= i\hbar \varepsilon_{abc} \mathbf{d}_c
 \end{aligned} \tag{4.72}$$

Die Matrixelemente eines Vektoroperators bezüglich der Drehimpuls-Eigenzustände lassen sich weitgehend algebraisch berechnen.

$$\begin{aligned}
 \pm \hbar \langle F, m_F | \mathbf{d}_{\pm} | F', m'_F \rangle &= \langle F, m_F | [\mathbf{F}_z, \mathbf{d}_{\pm}] | F', m'_F \rangle \\
 &= \langle F, m_F | \mathbf{F}_z \mathbf{d}_{\pm} - \mathbf{d}_{\pm} \mathbf{F}_z | F', m'_F \rangle \\
 &= \hbar(m_F - m'_F) \langle F, m_F | \mathbf{d}_{\pm} | F', m'_F \rangle
 \end{aligned} \tag{4.73}$$

woraus folgt, dass $\langle F, m_F | \mathbf{d}_{\pm} | F', m'_F \rangle$ nur dann ungleich null ist, wenn $\Delta m := m_F - m'_F = \pm 1$ ist. Da \mathbf{d}_z mit \mathbf{F}_z kommutiert zeigt man analog

$$\begin{aligned}
 0 &= \langle F, m_F | [\mathbf{F}_z, \mathbf{d}_z] | F', m'_F \rangle \\
 &= \hbar(m_F - m'_F) \langle F, m_F | \mathbf{d}_z | F', m'_F \rangle
 \end{aligned} \tag{4.74}$$

Insgesamt erhalten wir die *Auswahlregeln für die magnetische Quantenzahl*

$$\langle F, m_F | \mathbf{d}_z | F', m'_F \rangle \neq 0 \quad \text{ist nur möglich für} \quad m_F = m'_F \tag{4.75}$$

$$\langle F, m_F | \mathbf{d}_+ | F', m'_F \rangle \neq 0 \quad \text{ist nur möglich für} \quad m_F = m'_F + 1 \tag{4.76}$$

$$\langle F, m_F | \mathbf{d}_- | F', m'_F \rangle \neq 0 \quad \text{ist nur möglich für} \quad m_F = m'_F - 1 \tag{4.77}$$

Weitergehende Aussagen über die Matrixelemente von \mathbf{d} erlaubt das

Wigner-Eckart-Theorem (hier nur für Vektoroperatoren): Die „sphärischen“ Matrixelemente $\{\mathbf{d}_1, \mathbf{d}_0, \mathbf{d}_{-1}\} := \{-\mathbf{d}_+/\sqrt{2}, \mathbf{d}_z, \mathbf{d}_-/\sqrt{2}\}$ eines Vektoroperators sind gegeben durch

$$\langle F, m_F | \mathbf{d}_q | F', m'_F \rangle = \langle F', m'_F; 1, q | F, m_F, (1, F') \rangle \frac{\mathcal{D}(F, F')}{\sqrt{2F+1}}. \tag{4.78}$$

Hierbei wird $\mathcal{D}(F, F')$ als reduzierte Matrixelement bezeichnet.

Dieses ausgesprochen wichtige Theorem besagt, dass die Matrixelemente von Vektoroperatoren (und Tensoroperatoren im Allgemeinen) proportional zu Clebsch-Gordan-Koeffizienten sind (Siehe Einschub 12.2).

Zum Beweis des Theorems schreiben wir die Kommutator-Relationen (4.70) in der Form

$$[\mathbf{F}_z, \mathbf{d}_q] = q\hbar\mathbf{d}_q, \quad [\mathbf{F}_\pm, \mathbf{d}_q] = \hbar\sqrt{2 - q(q \pm 1)}\mathbf{d}_{q\pm 1}. \quad (4.79)$$

Hieraus folgt

$$\begin{aligned} \langle F, m_F | [\mathbf{F}_\pm, \mathbf{d}_{-q}] | F', m'_F \rangle &= \hbar\sqrt{2 + q(-q \pm 1)} \langle F, m_F | \mathbf{d}_{-q\pm 1} | F', m'_F \rangle \\ &= \langle F, m_F | \mathbf{F}_\pm | F, m_F \mp 1 \rangle \langle F, m_F \mp 1 | \mathbf{d}_{-q} | F', m'_F \rangle - \\ &\quad \langle F, m_F | \mathbf{d}_{-q} | F', m'_F \pm 1 \rangle \langle F', m'_F \pm 1 | \mathbf{F}_\pm | F', m'_F \rangle. \end{aligned} \quad (4.80)$$

Setzt man $D_{m'_F, m_F, q} := \langle F, m_F | \mathbf{d}_{-(q+1)} | F', m'_F \rangle$ und verwendet man die Werte (12.6) für die Matrixelemente der Drehimpulsoperatoren, so folgt

$$\begin{aligned} D_{m'_F \pm 1, m_F, q} \sqrt{F'(F' + 1) - (m'_F + 1)(m'_F + 1 \pm 1)} &= \\ D_{m'_F, m_F \mp 1, q} \sqrt{F(F + 1) - (m_F + 1)(m_F + 1 \mp 1)} + \\ D_{m'_F, m_F, q \mp 1} \sqrt{2 - (q + 1)(q + 1 \mp 1)} \end{aligned} \quad (4.81)$$

Dieses homogene lineare Gleichungssystem hat dieselben Koeffizienten wie das entsprechende Gleichungssystem Gl. (12.12) für die Clebsch-Gordan-Koeffizienten, wenn man die Ersetzungen $(j, m_j) \rightarrow (F', m'_F)$, $(l, m_l) \rightarrow (F, m_F)$ und $(s, m_s) \rightarrow (1, q)$ macht. Die Koeffizienten D und C müssen daher proportional zueinander sein, was das Theorem beweist (der Faktor $1/\sqrt{2F + 1}$ ist Konvention).

Das Wigner-Eckart-Theorem erlaubt eine anschauliche Interpretation. Die Dipolkopplung vermittelt die Absorption oder Emission eines Photons, dessen Spin Eins ist. Bei der Absorption oder Emission muß der Gesamtdrehimpuls erhalten bleiben, daher müssen bei dem Prozess die Drehimpulse wie im Abschnitt 12.2 besprochen addiert werden.

Das Wigner-Eckart-Theorem läßt nur noch die Frage offen, wie der m -unabhängige Vorfaktor $\mathcal{D}(F, F')$ aussieht. Prinzipiell erhält man ihn, wenn man einen bestimmten Übergang m, m' betrachtet und ihn für diese Zustände berechnet. Das ist jedoch sehr schwierig und erfordert erheblichen numerischen Aufwand, so dass man zumeist entweder die experimentell gemessenen Werte einsetzt oder sich mit der folgenden Abschätzung behilft. Der Operator des Dipolmoments ist definiert als Elektronen-Ladung mal Elektronen-Relativkoordinate im Atom. Man kann daher davon ausgehen, dass die Dipolmatrixelemente von der Größenordnung ea_0 sind, wobei a_0 der Bohrsche Radius ist und grob den mittleren Abstand der Elektronen vom Kern beschreibt. Diese Daumenregel erlaubt für viele Fälle eine vernünftige Abschätzung.

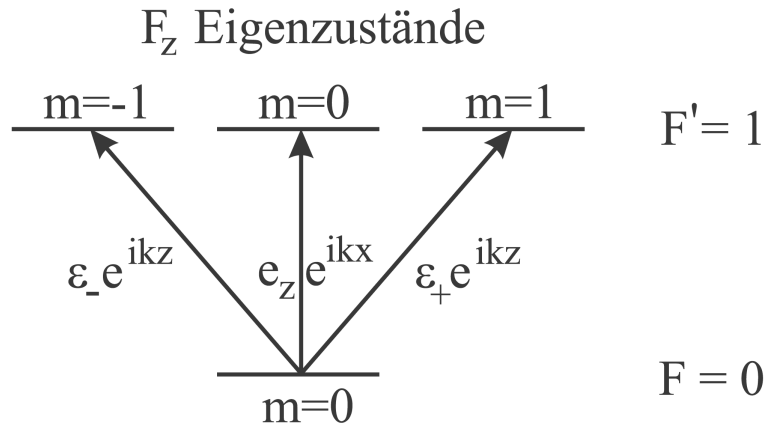
Eine weitere wichtige Frage ist die physikalische Bedeutung der sphärischen Komponenten \mathbf{d}_q des Dipolmoments. Betrachten wir dazu eine laufende klassische Laserwelle entlang der Quantisierungsachse (= z-Achse), $\mathbf{E}^{(+)}(\mathbf{x}) = \exp(ikz)\boldsymbol{\epsilon}\exp(-i\omega t)$, die einen Übergang zwischen dem Grundzustand $|J_g, m_g\rangle$ und dem angeregten Zustand $|J_e, m_e\rangle$ treiben soll. Das Übergangsmatrixelement ist dann gegeben durch

$$I = -\exp(ikz)\exp(-i\omega t)\langle J_e, m_e | \mathbf{d} \cdot \boldsymbol{\epsilon} | J_g, m_g \rangle \quad (4.82)$$

Ist der Laserstrahl links/rechtszirkular polarisiert, so gilt $\epsilon_{\pm} = (e_x \pm ie_y)/\sqrt{2}$ und somit

$$\begin{aligned} \mathbf{d} \cdot \epsilon_{\pm} &= \frac{1}{\sqrt{2}}(d_x \pm id_y) \\ &= \mp d_{\pm 1} . \end{aligned} \quad (4.83)$$

Linkszirkular polarisiertes Licht eines entlang der Quantisierungsachse laufenden Laserstrahls koppelt also an \mathbf{d}_1 und erfordert daher $m_e = m_g + 1$. Genauso kann man zeigen, dass $\epsilon = e_z$ eine Kopplung an \mathbf{d}_0 und damit $m_e = m_g$ nach sich zieht. Ein entsprechender Laserstrahl muß senkrecht zur Quantisierungsachse propagieren, da sein Wellenvektor senkrecht auf e_z stehen muß.⁴



Es muß noch einmal betont werden, dass zirkular polarisiertes Licht nur dann $m_e = m_g \pm 1$ erfordert, wenn der Laserstrahl entlang der Quantisierungsachse propagiert. In alle anderen Richtungen kann ein solcher Strahl an alle Komponenten \mathbf{d}_q koppeln. Zum Beispiel hat ein linkszirkular polarisierter Strahl entlang der x-Achse die Polarisation $\epsilon = (-e_z + ie_y)/\sqrt{2}$ und koppelt wegen $\mathbf{d} \cdot \epsilon = -\mathbf{d}_0/\sqrt{2} - (\mathbf{d}_1 + \mathbf{d}_{-1})/2$ an alle drei Komponenten. Entsprechend gilt dann $m_e = m_g + i$, $i = -1, 0, 1$.

Zum Abschluß dieses Abschnittes sollen noch einmal die allgemeinen Auswahlregeln zusammengefasst werden, die man aus den Eigenschaften der Clebsch-Gordan-Koeffizienten ableiten kann:

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

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

Für $J' = J$ ist der Übergang $m = 0 \rightarrow m' = 0$ verboten.

⁴Diese Aussage ist eigentlich zu stark. Da echte Laserstrahlen immer fokussiert sind, tragen zu ihnen auch Wellenvektoren bei, die nicht exakt parallel zur Ausbreitungsachse liegen. Ein echter Laser hat daher immer auch einen kleinen longitudinal polarisierten Anteil, der aber meistens vernachlässigt werden kann.

Kapitel 5

Das 2-Niveau Modell für Atome

Beleuchtet man Atome im Grundzustand mit der Energie E_g mit einem Laserstrahl, dessen Photonen die Energie $\hbar\omega$ haben, so können diese die Energie des Photons absorbieren und in einen angeregten Zustand mit $E' = E_g + \hbar\omega$ übergehen. Wegen der Energieerhaltung muß für den angeregten Zustand $|e\rangle$ $E' \approx E_e$ gelten. In dieser Situation können alle anderen Niveaus vernachlässigt werden. Das Atom erscheint dann als neutrales Teilchen mit nur 2 inneren Freiheits-

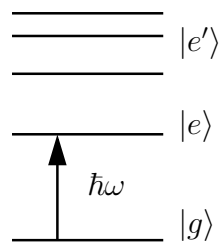
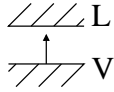


Abbildung 5.1: Absorbtion eines Photons durch ein Atom

graden $|g\rangle$ und $|e\rangle$; es ähnelt damit z. B. einem einzelnen Neutron mit Spin $\frac{1}{2}$. Modelle mit 2-Niveaus tauchen in der Quantenmechanik häufig auf, z. B.

- Spin $\frac{1}{2}$ Teilchen
- Photonen mit Polarisation
- die Bandkanten von Valenz- und Leitungsband 
- Atome und Moleküle
- Ionen
- Josephson-Effekt in Supraleitern
- 2 Interferrometer

- Qbits

Der Inhalt dieses Kapitels kann mathematisch auch auf diese anderen Modelle angewendet werden.

Zwei-Niveau-Modelle erlauben eine bessere Veranschaulichung komplizierter Vorgänge. Trotz ihrer einfachen Form liefern sie oft auch quantitativ gute Ergebnisse.

5.1 Herleitung des 2-Niveau Systems

Beispiel: H-Atom Die Eigenzustände (ohne Spin) haben die Form $|nlm\rangle$. In Abwesenheit eines Magnetfeldes sind diese bezüglich m entartet. Benutzt man nun Laserlicht der Frequenz

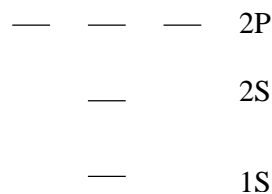


Abbildung 5.2: Skizze der Wasserstoff-Energieniveaus

$\omega \approx (E_{2P} - E_{1S})/\hbar$ so können alle Multipletts außer $1S$ und $2P$ vernachlässigt werden. Wir erhalten ein System mit vier Zuständen. Systeme aus zwei Multipletts werden manchmal bereits als 2-Niveau System bezeichnet (wegen der 2 Energieniveaus). Bei Hyperfeinspin-Entartung können dabei recht viele Zustände beteiligt sein. Um ein echtes 2-Niveau System (mit zwei

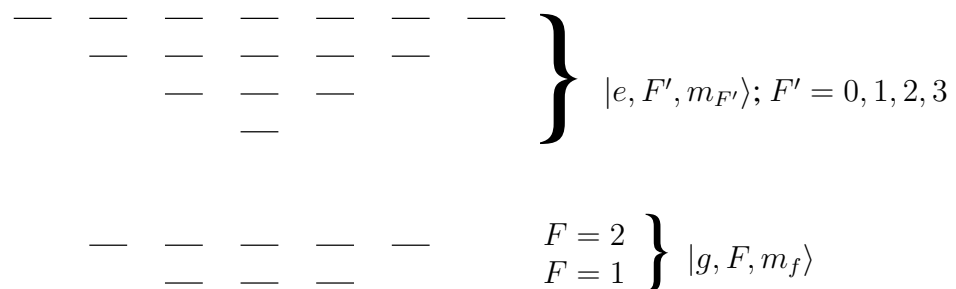
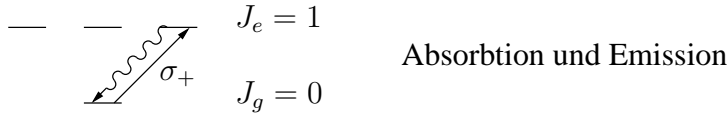


Abbildung 5.3: Feinstrukturaufspaltung im Rb⁸⁷. Auch wenn man Licht verwendet, dass resonant mit zwei Energieniveaus (z.B. $F = 1 \rightarrow F' = 2$) ist, sind im Allgemeinen sehr viele Zustände an dem Übergang beteiligt.

Zuständen statt zwei Energieniveaus) zu realisieren, muß man Laser mit geeigneter Polarisation benutzen und auf die spontane Emission (die auch den Auswahlregeln folgt) achten.

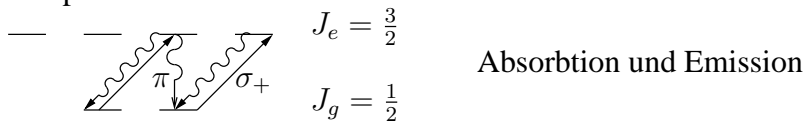
Beispiele für Zwei-Niveau Systeme

1. Beispiel:



Pumpt man mit zirkular polarisiertem Licht, so kommen nur die beiden Niveaus rechts für Übergänge in Frage. Man erhält so ein effektives 2-Niveau System.

2. Beispiel:



Mechanismus:

- $|m_g = \frac{1}{2}\rangle$ ist nur an $|m_e = \frac{3}{2}\rangle$ gekoppelt und bildet ein 2-Niveau System
- $|m_g = -\frac{1}{2}\rangle$ ist an $|m_e = \frac{1}{2}\rangle$ gekoppelt. Dieser zerfällt spontan in $|m_g = -\frac{1}{2}\rangle$ und $|m_g = \frac{1}{2}\rangle$. Bei jeder spontanen Emission wird daher Population auf das echte 2-Niveau System $|m_g = \frac{1}{2}\rangle, |m_e = \frac{3}{2}\rangle$ übertragen.
- Nach vielen spontanen Emissionen sind praktisch alle Atome in diesem 2-Niveau System.

5.1.1 Darstellung von Operatoren

Ab jetzt betrachten wir nur noch ein 2-Niveau System mit den Zuständen $|g\rangle, |e\rangle$. Die Operatoren in diesem System werden gewonnen durch:

$$\hat{O} = \sum_{n=0}^{\infty} |n\rangle \langle n| \hat{O} \sum_{m=0}^{\infty} |m\rangle \langle m| \approx \sum_{n,m=e,g} |n\rangle O_{nm} \langle m|$$

mit: $O_{nm} = \langle n|\hat{O}|m\rangle = \begin{pmatrix} O_{ee} & O_{eg} \\ O_{ge} & O_{gg} \end{pmatrix}$

Die wichtigsten Operatoren sind:

Einsoperator $1 = \begin{pmatrix} 1 & \\ & 1 \end{pmatrix}$

Hamiltonian $H_0 = \begin{pmatrix} E_e & \\ & E_g \end{pmatrix}$ da $|e\rangle, |g\rangle$ Eigenzustände von H_0 sind

Orts-/Dipoloperator der Elektronen $x \propto d = -ex$ mit den Matrixelementen

$$\langle e|d|g\rangle := d_{eg} = d_{ge}^*$$

$$\langle e|d|e\rangle = \langle g|d|g\rangle = 0$$

Das Verschwinden der Diagonalelemente folgt dabei daraus, dass $|e\rangle$ und $|g\rangle$ Eigenzustände des Paritätsoperators sind und \mathbf{d} die Parität -1 hat. Es gilt also

$$\mathbf{d} = \mathbf{d}_{eg} \cdot \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} + \mathbf{d}_{eg}^* \cdot \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & \mathbf{d}_{eg} \\ \mathbf{d}_{eg}^* & 0 \end{pmatrix} = -e \begin{pmatrix} 0 & \mathbf{x}_{eg} \\ \mathbf{x}_{eg}^* & 0 \end{pmatrix} \quad (5.1)$$

wobei \mathbf{x}_{eg} das Matrixelement der Relativkoordinate der Elektronen ist.

Impulsoperator der Elektronen Zunächst wie beim Ortsoperator $\langle g|\mathbf{p}|g\rangle = 0$ und $\langle e|\mathbf{p}|e\rangle = 0$. Es sind also nur noch die Außerdiagonalelemente zu bestimmen. Dazu verwendet man einen Trick, nämlich:

$$[\mathbf{x}, H_0] = \frac{i\hbar}{m_e} \mathbf{p} \quad (5.2)$$

Dies folgt aus $H_0 = \sum_{\alpha} \frac{1}{2m_e} \mathbf{p}_{\alpha}^2 + \sum_{\alpha,\beta} V(\alpha, \beta)$ und $\mathbf{p} = \sum_{\alpha} \mathbf{p}_{\alpha}$, $\mathbf{x} = \sum_{\alpha} \mathbf{x}_{\alpha}$. Denn es gilt

$$\begin{aligned} [\mathbf{x}_{\alpha}, H_0] &= \sum_{\alpha'} \frac{1}{2m_e} [\mathbf{x}_{\alpha}, \mathbf{p}_{\alpha'}^2] \\ &= \frac{i\hbar}{m_e} \mathbf{p}_{\alpha} \end{aligned}$$

Also gilt

$$\begin{aligned} \langle e|\mathbf{p}|g\rangle &= \frac{m_e}{i\hbar} \langle e|[\mathbf{x}, H_0]|g\rangle \\ &= \frac{im_e}{\hbar} (E_e - E_g) \langle e|\mathbf{x}|g\rangle \end{aligned}$$

Womit also die Matrixdarstellung des elektronischen Impulses

$$\mathbf{p} = \frac{m_e \omega_0}{e} \begin{pmatrix} 0 & -i\mathbf{d}_{eg} \\ i\mathbf{d}_{eg}^* & 0 \end{pmatrix} \quad (5.3)$$

$$\omega_0 = \frac{E_e - E_g}{\hbar} \quad (5.4)$$

lautet.

5.1.2 Kopplung eines 2-Niveau-Atoms an ein elektromagnetisches Feld

Betrachten wir eine elektromagnetische Welle mit dem positiven Frequenzanteil des Vektorpotentials in der Form

$$\mathbf{A}^{(+)}(t, \mathbf{R} = 0) = \mathbf{A}_0 e^{-i\omega_L t} \quad \mathbf{R}: \text{Schwerpunkt des Atoms} \quad (5.5)$$

Der Wechselwirkungs-Hamiltonian lautet in Dipol-Kopplung ($\mathbf{E} = -\dot{\mathbf{A}}$)

$$\begin{aligned} H_{int} &= -\mathbf{d} \cdot \mathbf{E} \\ &= -\mathbf{d}(\mathbf{E}^{(+)} + \mathbf{E}^{(-)}) \\ &= -i\omega_L(\mathbf{d}_{eg}|e\rangle\langle g| + \mathbf{d}_{eg}^*|g\rangle\langle e|)(\mathbf{A}_0 e^{-i\omega_L t} - \mathbf{A}_0^* e^{i\omega_L t}) \end{aligned} \quad (5.6)$$

Zum Vergleich die minimale Kopplung:

$$H'_{int} = \frac{e}{m_e} \mathbf{p} \cdot \mathbf{A} = -i\omega_0(\mathbf{d}_{eg}|e\rangle\langle g| - \mathbf{d}_{eg}^*|g\rangle\langle e|)(\mathbf{A}_0 e^{-i\omega_L t} + \mathbf{A}_0^* e^{i\omega_L t}) \quad (5.7)$$

Abgesehen von Vorzeichen, die sich durch Phasenfaktoren an den Basiszuständen und durch Verschieben der Schwerpunktskoordinate wegtransformieren lassen, liegt der Hauptunterschied in den Vorfaktoren ω_L bzw. ω_0 . Der Grund für diesen Unterschied ist, daß man nur einen Teil des in seiner Gänze unitär invarianten Hamiltonian betrachtet. In Abbildung 5.4 ist die unitäre Transformation als Drehung im Hilbertraum dargestellt. Anschaulich bedeutet das: Die unitäre Power-

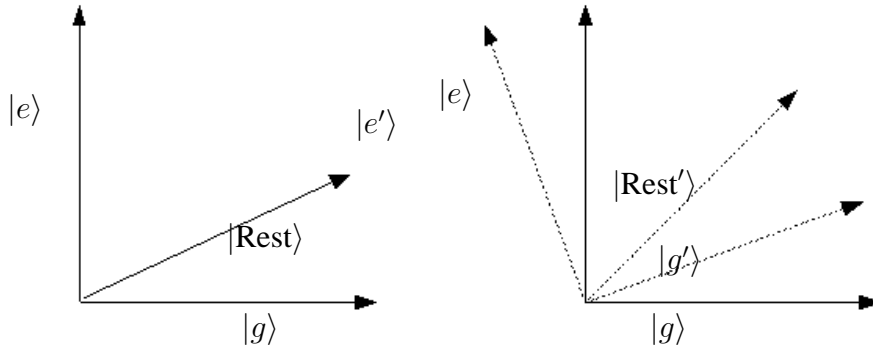


Abbildung 5.4: Unitäre Transformation $|\psi'\rangle = U|\psi\rangle$

Zieman-Woolley-Transformation “dreht” die Zustände im Hilbertraum. Die 2-Niveau-Näherung ist aber eine Projektion auf einen zweidimensionalen Unterraum. Je nachdem, ob man diese Projektion vor ($|e\rangle$ und $|g\rangle$) oder nach ($|e'\rangle$ und $|g'\rangle$) der Power-Zieman-Woolley-Transformation durchführt, erhält man ein unterschiedliches Ergebnis, da man ja unterschiedliche zweidimensionale Unterräume betrachtet.

In der Praxis ist dieser Unterschied aber unwichtig, da lediglich der Fall $\omega_0 \approx \omega_L$ interessant ist.

¹ Im Folgenden verwenden wir die $-\mathbf{d} \cdot \mathbf{E}$ -Kopplung. Definiere die *Rabi-Frequenz*

$$\boxed{\Omega := \frac{1}{\hbar} \mathbf{d}_{eg} \cdot \mathbf{E}_0 = \frac{1}{\hbar} \mathbf{d}_{eg} \cdot \mathbf{A}_0 \omega_L} \quad (5.8)$$

mit $\mathbf{E}_0 := \mathbf{A}_0 \omega_L$, und als Abkürzung für eine weniger wichtige Größe:

$$\tilde{\Omega} = \frac{1}{\hbar} \mathbf{d}_{eg} \mathbf{E}_0^* \quad (5.9)$$

¹ $\omega_0 \approx \omega_L$ ist eine Voraussetzung für das Zwei-Niveau-Modell.

Damit ist

$$H_{int} = -i\hbar |e\rangle \langle g| (\Omega e^{-i\omega_L t} - \tilde{\Omega} e^{i\omega_L t}) + i\hbar |g\rangle \langle e| (\Omega^* e^{i\omega_L t} - \tilde{\Omega}^* e^{-i\omega_L t}) \quad (5.10)$$

Der ungestörte Hamiltonian ist:

$$H_0 = \begin{pmatrix} E_e & 0 \\ 0 & E_g \end{pmatrix} = \frac{1}{2}(E_e + E_g)\mathbf{1} + \frac{1}{2}(E_e - E_g)\sigma_z \quad (5.11)$$

Durch Wahl von E_g (der Energienullpunkt kann beliebig gewählt werden) kann man H_0 in verschiedener Weise darstellen:

$$E_e + E_g = 0 \Rightarrow H_0 = \frac{\hbar\omega_0}{2}\sigma_z, \quad \omega_0 = \frac{E_e - E_g}{\hbar} \quad (5.12)$$

$$E_g = 0 \Rightarrow H_0 = (E_e - E_g) \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} = \hbar\omega_0 \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (5.13)$$

Im Folgenden wird von der *Rotating-Wave-Approximation* Gebrauch gemacht. Diese wird häufig benutzt, sie funktioniert sehr gut und vereinfacht die Rechnungen erheblich. Dazu geht man zunächst ins Wechselwirkungsbild. Dabei wird die zeitliche Entwicklung aufgrund von H_0 auf die Wellenfunktion übertragen:

$$|\psi\rangle = e^{-iH_0 t/\hbar} |\tilde{\psi}\rangle = U |\tilde{\psi}\rangle \quad (5.14)$$

Die transformierte Schrödinger-Gleichung lautet $i\hbar |\dot{\tilde{\psi}}\rangle = \tilde{H} |\tilde{\psi}\rangle$ und der Hamiltonian wird umgeformt gemäß

$$\begin{aligned} \tilde{H} &= -i\hbar U^\dagger \dot{U} + U^\dagger (H_0 + H_{int}) U = U^\dagger H_{int} U \\ &= -i\hbar |e\rangle \langle g| (\Omega e^{-i(\omega_L - \omega_0)t} - \tilde{\Omega} e^{i(\omega_L + \omega_0)t}) + \text{H.c.} \end{aligned} \quad (5.15)$$

Der $e^{i(\omega_L + \omega_0)t}$ -Term oszilliert sehr schnell und ist im zeitlichen Mittel daher ungefähr Null. Man erhält damit folgende einfache Form für den Hamiltonian im Wechselwirkungs-Bild

$$\boxed{\tilde{H}_{WW}(t) = -i\hbar e^{-i\Delta t} \Omega |e\rangle \langle g| + i\hbar \Omega^* e^{i\Delta t} |g\rangle \langle e|} \quad (5.16)$$

Es wurde dabei noch der Ausdruck für die Laser-Verstimmung $\Delta = \omega_L - \omega_0$ benutzt.

Wenn man ins Schrödingerbild zurückkehrt, ergibt sich:

$$\boxed{H = \frac{\hbar\omega_0}{2}\sigma_z + \hbar \begin{pmatrix} 0 & -i\Omega e^{-i\omega_L t} \\ i\Omega^* e^{i\omega_L t} & 0 \end{pmatrix}} \quad (5.17)$$

Durch eine unitäre Transformation läßt sich erreichen, daß H nur noch vom Betrag von Ω abhängt. Diese verziert $|e\rangle$ mit einer Phase $e^{i\varphi}$, wobei $-i\Omega = |\Omega|e^{i\varphi}$.

$$\begin{aligned} U : |e\rangle &\rightarrow e^{i\varphi} |e\rangle \\ U &= \begin{pmatrix} e^{i\varphi} & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (5.18)$$

Damit wird der Hamiltonian maximal vereinfacht:

$$U^\dagger H U = \frac{\hbar\omega_0}{2}\sigma_z + \hbar \begin{pmatrix} 0 & |\Omega|e^{-i\omega_L t} \\ |\Omega|e^{i\omega_L t} & 0 \end{pmatrix} \quad (5.19)$$

5.2 Rabi-Oszillationen und Landau-Zener-Übergänge

Als nächstes Problem sei die Zeitentwicklung eines Zustandes mit Hamiltonian H wie im vorhergehenden Abschnitt betrachtet.

$$i\hbar\partial_t \begin{pmatrix} \psi_e \\ \psi_g \end{pmatrix} = \hbar \begin{pmatrix} \frac{\omega_0}{2} & -i\Omega e^{-i\omega_L t} \\ i\Omega^* e^{i\omega_L t} & -\frac{\omega_0}{2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_e \\ \psi_g \end{pmatrix} \quad (5.20)$$

Ohne den zeitabhängigen Faktor $e^{i\omega_L t}$ wäre diese Gleichung recht einfach lösbar. Man kann ihn durch eine unitäre Transformation entfernen:

$$U = e^{-i\frac{\omega_L}{2}\sigma_z t} = \begin{pmatrix} e^{-i\frac{\omega_L}{2}t} & 0 \\ 0 & e^{i\frac{\omega_L}{2}t} \end{pmatrix} \quad \begin{pmatrix} \psi_e \\ \psi_g \end{pmatrix} = U \begin{pmatrix} \tilde{\psi}_e \\ \tilde{\psi}_g \end{pmatrix} \quad (5.21)$$

Die transformierte Bewegungsgleichung ist:

$$\begin{aligned} i\hbar\partial_t \begin{pmatrix} \tilde{\psi}_e \\ \tilde{\psi}_g \end{pmatrix} &= \left(-i\hbar U^\dagger \dot{U} + U^\dagger H U \right) \begin{pmatrix} \tilde{\psi}_e \\ \tilde{\psi}_g \end{pmatrix} \\ &= \left\{ -\frac{\hbar\omega_L}{2}\sigma_z + \frac{\hbar\omega_0}{2}\sigma_z + \hbar \begin{pmatrix} 0 & -i\Omega \\ i\Omega^* & 0 \end{pmatrix} \right\} \begin{pmatrix} \tilde{\psi}_e \\ \tilde{\psi}_g \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (5.22)$$

Also ergibt sich für \tilde{H} :

$$\tilde{H} = \hbar \begin{pmatrix} -\frac{\Delta}{2} & -i\Omega \\ i\Omega^* & \frac{\Delta}{2} \end{pmatrix} \quad (5.23)$$

Ein solcher zeitunabhängiger Hamiltonian ist nur in der Rotating-Wave-Approximation möglich. Die gegenrotierenden Terme wären auch nach der Transformation Gleichung (5.21) noch zeitabhängig. Die Schrödinger-Gleichung lässt sich nun einfach lösen:

$$\begin{pmatrix} \tilde{\psi}_e(t) \\ \tilde{\psi}_g(t) \end{pmatrix} = e^{-it\tilde{H}/\hbar} \begin{pmatrix} \tilde{\psi}_e(0) \\ \tilde{\psi}_g(0) \end{pmatrix} \quad (5.24)$$

Schreibe nun \tilde{H} um. Es treten nur drei Komponenten auf, da der Hamiltonian spurfrei und hermitisch ist.

$$\tilde{H} = \hbar \mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\sigma}, \quad \mathbf{n} = \begin{pmatrix} \text{Im}\Omega \\ \text{Re}\Omega \\ -\frac{\Delta}{2} \end{pmatrix} \quad (5.25)$$

Der Ausdruck $e^{-it\mathbf{n}\cdot\boldsymbol{\sigma}}$ lässt sich in eine Potenzreihe entwickeln:

$$e^{-it\mathbf{n}\cdot\boldsymbol{\sigma}} = \sum_{l=0}^{\infty} \frac{1}{l!} (-it)^l (\mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\sigma})^l \quad (5.26)$$

Für das Produkt zweier σ -Matrizen gilt:

$$\sigma_i \sigma_j = i \varepsilon_{ijk} \sigma_k + \delta_{ij} \mathbf{1} \quad (5.27)$$

$$\Rightarrow (\mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\sigma})^2 = n_i \sigma_i n_j \sigma_j = n_i n_j (i \varepsilon_{ijk} \sigma_k + \delta_{ij} \mathbf{1}) = |\mathbf{n}|^2 \mathbf{1} \quad (5.28)$$

$$(\mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\sigma})^{2l} = |\mathbf{n}|^{2l} \mathbf{1} \quad (5.29)$$

Damit läßt sich $e^{-it\mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\sigma}}$ schreiben:

$$e^{-it\mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\sigma}} = \sum_{l=0}^{\infty} \frac{(-it)^{2l}}{(2l)!} (\mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\sigma})^{2l} + \sum_{l=0}^{\infty} \frac{(-it)^{2l+1}}{(2l+1)!} (\mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\sigma})^{2l+1} \quad (5.30)$$

$$\boxed{e^{-it\mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\sigma}} = \cos(|\mathbf{n}|t) \mathbf{1} - i \frac{\mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\sigma}}{|\mathbf{n}|} \sin(|\mathbf{n}|t)} \quad (5.31)$$

Als weitere Abkürzung verwenden wir:

$$w \doteq |\mathbf{n}| = \sqrt{\left(\frac{\Delta}{2}\right)^2 + |\Omega|^2} \quad (5.32)$$

Dieser Ausdruck ist nur vom Betrag von Ω abhängig.

Wenn das Atom anfangs im Grundzustand ist, lautet die Lösung

$$\begin{pmatrix} \tilde{\psi}_e(0) \\ \tilde{\psi}_g(0) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \Rightarrow \boxed{\begin{pmatrix} \tilde{\psi}_e(t) \\ \tilde{\psi}_g(t) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\frac{\Omega}{w} \sin(wt) \\ \cos(wt) - i \frac{\Delta}{2w} \sin(wt) \end{pmatrix}} \quad (5.33)$$

Die Wahrscheinlichkeitsamplitude $\tilde{\psi}_e(t)$ für die Anregung oszilliert mit der Frequenz w , man nennt dies die *Rabi-Oszillationen*. Es gilt:

$$\mathcal{P}_e(t) = |\tilde{\psi}_e(t)|^2 = \frac{|\Omega|^2}{w^2} \sin^2(wt) \quad (5.34)$$

Der maximale Wert von \mathcal{P}_e wird erreicht für $wt = \pi/2 + n\pi$ und ist gegeben durch

$$\mathcal{P}_e \propto \frac{|\Omega|^2}{\left(\frac{\Delta}{2}\right)^2 + |\Omega|^2} \quad (5.35)$$

Wenn der Laser nicht gegenüber der Resonanzfrequenz verstimmt ist, $\Delta = 0$, ist vollständige Anregung ($\mathcal{P}_e = 1$) möglich. \mathcal{P}_e hängt stark von der Verstimmung ab:

$$\Delta \gg |\Omega| \Rightarrow \mathcal{P}_e \approx \frac{|\Omega|^2}{\Delta^2} \ll 1 \quad (5.36)$$

Die Anregungswahrscheinlichkeit hängt also vom Verhältnis der Rabi-Frequenz zur Verstimmung ab.² Diese Ergebnisse sind sehr relevant für Atomoptik, Quantenoptik, Elektronen-Spinresonanz, Kernspinresonanz, Interferometrie und in vielen weiteren Bereichen.

²Es wird oft behauptet, dass die Anregungswahrscheinlichkeit vom Verhältnis der Rabi-Frequenz zur Lebensdauer des angeregten Zustands abhängt. Wie wir später sehen werden ist dieses Verhältnis für kleine Laser-Verstimmungen auch wichtig. Das Verhältnis Ω/Δ spielt jedoch allgemein die größere Rolle.

Durch Laserpulse mit bestimmter Zeitdauer kann man wohldefinierte Zustände erzeugen. Der sogenannte ideale $\frac{\pi}{2}$ -Puls³ erzeugt eine 50-50 Superposition von Anregung und Grundzustand:

$$\Delta = 0 \quad t = \frac{\pi}{4\Omega} \Rightarrow \quad U = e^{-it\mathbf{n}\cdot\boldsymbol{\sigma}} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & -1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} \quad (5.37)$$

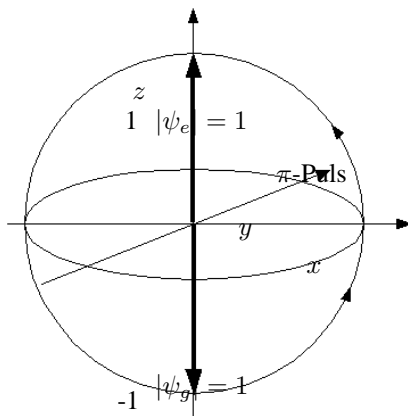
Der ideale π -Puls bringt alle Elektronen in den angeregten oder abgeregten Zustand:

$$\Delta = 0 \quad t = \frac{\pi}{2\Omega} \Rightarrow \quad U = \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad (5.38)$$

Zur Veranschaulichung der Zustände in einem Zwei-Niveau-System dient der Bloch-Vektor, der die Komponenten $\langle \boldsymbol{\sigma} \rangle = (v, w, u)$ hat. Es gilt

$$\begin{aligned} u &= \langle \sigma_z \rangle = |\psi_e|^2 - |\psi_g|^2 \\ v &= \langle \sigma_x \rangle = \psi_e^* \psi_g + \psi_g^* \psi_e \\ w &= \langle \sigma_y \rangle = -i(\psi_e^* \psi_g - \psi_g^* \psi_e) \end{aligned} \quad (5.39)$$

Der Bloch-Vektor eines reinen Zustandes hat die Länge 1, er bewegt sich auf der Blochkugel mit Radius 1 um den Koordinatenursprung.



$$u^2 + v^2 + w^2 = 1$$

Abbildung 5.5: Die Bloch-Kugel

Bei einem nicht verstimten Laser lassen sich die Rabi-Oszillationen so beschreiben:

$$\begin{pmatrix} \psi_e \\ \psi_g \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\sin(\Omega t) \\ \cos(\Omega t) \end{pmatrix} \quad (5.40)$$

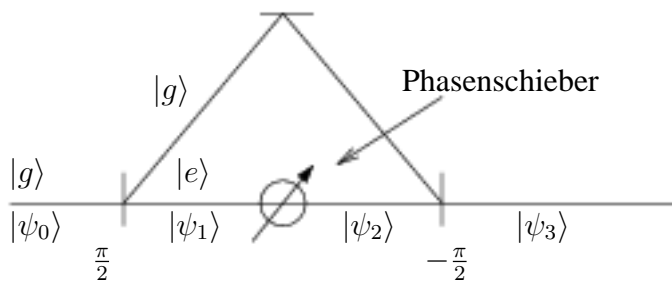
³In der Praxis hängt die Verstimung eines Atoms wegen des Doppler-Effekts auch von seinem Schwerpunkts-Impuls ab. Bei Zimmertemperatur macht dies einen idealen $\pi/2$ Puls in der oben dargestellten Form unmöglich. Für kalte Atome oder mit bestimmten Tricks lassen sich jedoch solche Pulse mit sehr guter Effizienz herstellen.

Der Bloch-Vektor ist dann:

$$\begin{pmatrix} v \\ w \\ u \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\sin(2\Omega t) \\ 0 \\ -\cos(2\Omega t) \end{pmatrix} \quad (5.41)$$

Für einen π -Puls, $t = \frac{\pi}{2\Omega}$ beschreibt der Bloch-Vektor einen Halbkreis, siehe Abbildung 5.5.

Interferometrie mit zwei internen Zuständen: ein Beispiel zur Anwendung von π und $\pi/2$ Pulsen 2-Niveau-Systeme und Rabi-Oszillationen lassen sich zur Herstellung eines Interferometers verwenden. Die beiden Zustände spielen dabei die Rolle der Interferometer-Arme, die Rabi-Oszillationen können Strahlteiler und Spiegel realisieren. Anschauliche Darstellung der Anordnung:



$$|\psi_0\rangle = |g\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

$$\begin{aligned} |\psi_1\rangle &= U_{\pi/2} |\psi_0\rangle \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & -1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} -1 \\ 1 \end{pmatrix} \\ &\Leftrightarrow \frac{1}{\sqrt{2}} (|g\rangle - |e\rangle) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} |\psi_2\rangle &= \begin{pmatrix} e^{i\varphi} & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} |\psi_1\rangle \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} (|g\rangle - e^{i\varphi} |e\rangle) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} |\psi_3\rangle &= U_{-\pi/2} |\psi_2\rangle \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ -1 & 1 \end{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} -e^{i\varphi} \\ 1 \end{pmatrix} \\ &= \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 - e^{-i\varphi} \\ 1 + e^{i\varphi} \end{pmatrix} \end{aligned}$$

$$\Leftrightarrow \frac{1}{2} (|g\rangle (1 + e^{i\varphi}) + |e\rangle (1 - e^{i\varphi}))$$

Messe die Anzahl der Atome in $|e\rangle$:

$$\begin{aligned} P_e &= |\langle \psi_3 | e \rangle|^2 \\ &= \left| \frac{1}{2} (1 - e^{i\varphi}) \right|^2 = \frac{1}{2} (1 - \cos \varphi) \end{aligned}$$

5.2.1 Landau-Zener-Übergänge

Landau-Zener-Übergänge sind nicht so wichtig wie Rabi-Oszillationen, spielen aber eine große Rolle zur Erklärung vieler Phänomene. Wesentlicher Unterschied zu Rabi-Oszillationen: Das Detuning ist zeitabhängig $\Delta = \Delta(t) = \dot{\Delta}_0 t$

$$H = \hbar \begin{pmatrix} -\frac{\dot{\Delta}_0}{2} t & \Omega \\ \Omega & \frac{\dot{\Delta}_0}{2} t \end{pmatrix}$$

wobei wir in der Rotating Wave Approximation arbeiten und $\Omega \in \mathbb{R}$ annehmen.

Bewegungsgleichung:

$$\begin{aligned} i\dot{\psi}_e &= -\frac{1}{2}\dot{\Delta}_0 t \psi_e + \Omega \psi_g \\ i\dot{\psi}_g &= \frac{1}{2}\dot{\Delta}_0 t \psi_g + \Omega \psi_e \end{aligned} \tag{5.42}$$

Leite die Gleichung für $\dot{\psi}_g$ nach der Zeit ab und erhalte

$$i\ddot{\psi}_g = \frac{1}{2}\dot{\Delta}_0 \psi_g + \frac{1}{2}\dot{\Delta}_0 t \dot{\psi}_g + \Omega \dot{\psi}_e$$

Einsetzen von (5.42) liefert

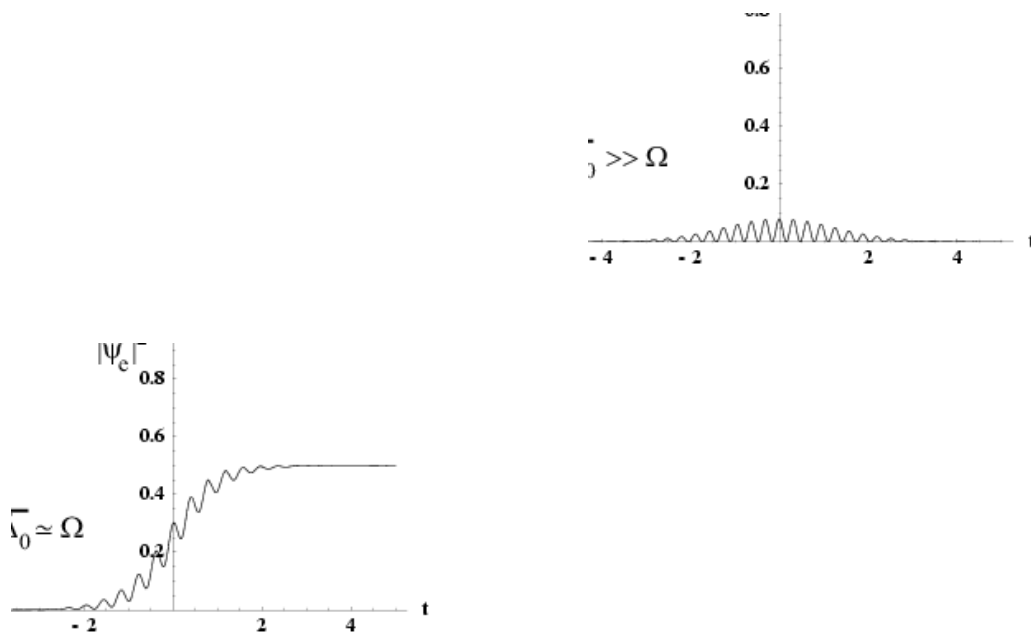
$$\ddot{\psi}_g = - \left(\Omega^2 + \frac{t^2 \dot{\Delta}_0^2}{4} + \frac{i}{2} \dot{\Delta}_0 \right) \psi_g$$

Führe neue Variable $y \equiv t\sqrt{\dot{\Delta}_0}$

$$\Rightarrow \psi_g'' = - \left(\frac{y^2}{4} + \frac{\Omega^2}{\dot{\Delta}_0} + \frac{i}{2} \right) \psi_g$$

Das ist die Standard-Form der DGL für parabolische Zylinderfunktionen (siehe [16]).

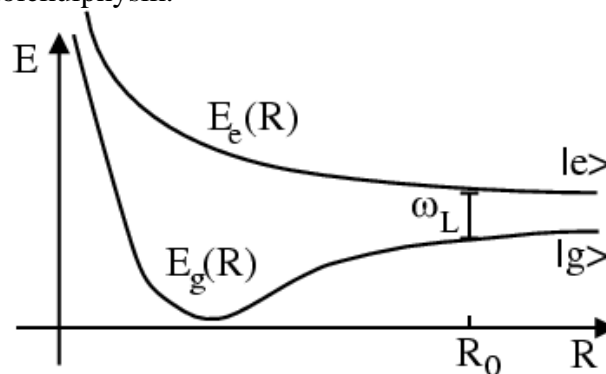
Die Lösungen lassen sich durch konfluente hypergeometrische Funktionen darstellen und haben typischerweise folgendes Aussehen für $\psi_g(-\infty) = 1$:



Die asymptotische Anregungswahrscheinlichkeit $P_0(+\infty)$ kann analytisch berechnet werden und lautet:

$$P_0(+\infty) = 1 - |\psi_g(+\infty)|^2 = 1 - e^{-\pi \frac{\Omega^2}{2\Delta_0}}$$

Landau-Zener-Übergänge sind in verschiedenen Bereichen wichtig. Die ursprüngliche Anwendung liegt in der Molekülphysik:



- Das Licht mit der Frequenz ω_L ist nur für einen bestimmten Kernabstand R_0 resonant.
- Die Zeitentwicklung der Elektronenzustände wird mit den Zuständen $|e(R)\rangle$, $|g(R)\rangle$ beschrieben und ist viel schneller als die Kernbewegung (wegen $M_p \gg M_e$)
- Der Kernabstand geht dann als (langsam zeitlich variierender) Parameter in die Bewegungsgleichungen der Elektronen ein:

$$i\hbar \begin{pmatrix} \dot{\psi}_e \\ \dot{\psi}_g \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\Delta E(R(t))/2 & \Omega \\ \Omega & \Delta E(R(t))/2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_e \\ \psi_g \end{pmatrix}$$

- In der Nähe von R_0 gilt $\Delta E(R(t)) = E_e - E_g \approx \underbrace{\Delta E(R_0)}_{\hbar\omega_L} + \underbrace{E'(R - R_0)}_{\approx v_0 t}$

$$\Rightarrow \Delta(t) = \omega_L - \Delta E(R(t))/\hbar = -E'v_0 t/\hbar$$

Landau-Zener-Übergänge sind auch wichtig für STIRAP und Bloch-Oszillatoren.

5.3 Dressed States

Dressed States heißen allgemein Zustände, die Eigenzustände von H einschließlich der Wechselwirkung mit einer oder wenigen Lichtmoden sind. Einfachster Fall: Wechselwirkung mit einem Laserstrahl wie oben

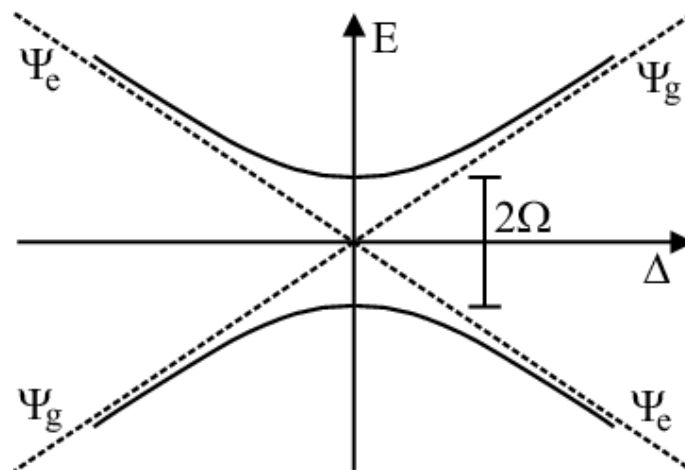
$$H\psi = E\psi$$

$$H = \hbar \begin{pmatrix} -\frac{\Delta}{2} & \Omega \\ \Omega^* & \frac{\Delta}{2} \end{pmatrix}$$

Die Eigenwerte dazu sind

$$E_{\pm} = \pm \hbar w = \pm \hbar \sqrt{\left(\frac{\Delta}{2}\right)^2 + |\Omega|^2}$$

$$\psi^{(\pm)} = \frac{1}{\sqrt{2w}} \begin{pmatrix} \frac{\Omega}{\sqrt{w \pm \Delta/2}} \\ \pm \sqrt{w \pm \Delta/2} \end{pmatrix}$$



Asymptotischer Fall, das heißt $\Delta \gg |\Omega|$. Verwende

$$w = \frac{|\Delta|}{2} \sqrt{1 + \frac{|\Omega|^2}{\Delta^2/4}} \approx \frac{|\Delta|}{2} \left(1 + \frac{1}{2} \frac{|\Omega|^2}{\Delta^2/4} + \dots \right)$$

$$\begin{aligned}\psi_e^{(+)} &\rightarrow \begin{cases} 0 & \Delta \rightarrow \infty \\ 1 & \Delta \rightarrow -\infty \end{cases} \\ \psi_e^{(-)} &\rightarrow \begin{cases} 1 & \Delta \rightarrow \infty \\ 0 & \Delta \rightarrow -\infty \end{cases}\end{aligned}$$

Man nennt dieses Phänomen “avoided crossing”: Für $\Omega = 0$ sind die Eigenzustände ψ_e und ψ_g . Ihre Eigenwerte kreuzen sich dann bei $\Delta = 0$. Die Kopplung durch den Laserstrahl für $\Omega \neq 0$ macht daraus zwei sich nicht schneidende Hyperbeln mit Energieabstand $2\hbar |\Omega|$.

Bemerkenswert: Folgt man einer Hyperbel, so geht man auf E_- von ψ_g nach ψ_e und auf E_+ von ψ_e nach ψ_g . Man kann für zeitabhängige $\Delta(t)$ einen Übergang von ψ_g nach ψ_e machen, ohne je einen Eigenvektor von $H(t)$ verlassen zu müssen.

Dies hängt eng mit Landau-Zener-Übergängen zusammen: Tunneln zwischen E_- und E_+ entspricht den nicht angeregten Atomen. Bei einem (Landau-Zener-) Übergang versucht der Zustand jedoch auf einer Hyperbel zu bleiben.

Man kann die asymptotische Übergangswahrscheinlichkeit auch mit Hilfe des Tunnelns zwischen den zwei Hyperbeln verstehen. Nach der WKB-Näherung (siehe z.B. [17]) kann die Tunnelwahrscheinlichkeit zur anderen Hyperbel durch $P = e^{-\Delta E t / \hbar}$ mit $\frac{\Delta E}{\hbar} = 2 |\Omega|$ ausgedrückt werden. Die typische Zeitskala t für das Tunneln ist in etwa dadurch gegeben, dass der Abstand zwischen den Hyperbeln auf $4 |\Omega|$ angestiegen ist

$$\begin{aligned}\Leftrightarrow 4 |\Omega|^2 &= \left(\frac{\Delta(t)}{2} \right)^2 + |\Omega|^2 \\ \Rightarrow \Delta &= \dot{\Delta}_0 t \approx 4 |\Omega| \\ \Rightarrow t &= \frac{4 |\Omega|}{\dot{\Delta}_0} \\ \Rightarrow P &= e^{-\frac{2|\Omega|4|\Omega|}{\dot{\Delta}_0}} = e^{-\frac{8|\Omega|^2}{\dot{\Delta}_0}}\end{aligned}$$

5.3.1 Dressed States in einer Cavity

Weitaus häufiger verwendet man den Begriff dressed states für ein quantisiertes Strahlungsfeld. Die Form des Zwei-Niveau-Hamiltonians kann genauso wie vorher hergeleitet werden. Einziger Unterschied: die Rabi-Frequenz wird operator-wertig:

$$\hat{\Omega} = \frac{1}{\hbar} \mathbf{d}_{eg} \cdot \hat{\mathbf{E}}^{(+)}(\mathbf{x}) \quad (5.43)$$

Daraus folgt der Hamilton-Operator zu:

$$H = \frac{\hbar\omega_0}{2} \sigma_z - \left[\mathbf{d}_{eg} \cdot \hat{\mathbf{E}}(\mathbf{x}) |e\rangle \langle g| + \mathbf{d}_{eg}^* \cdot \hat{\mathbf{E}}(\mathbf{x}) |g\rangle \langle e| \right] + H_{rad} \quad (5.44)$$

Dieses transformieren wir über

$$U = e^{-i\frac{\omega_0}{2}\sigma_z t} e^{-i\frac{H_{rad}t}{\hbar}} \quad (5.45)$$

wieder in das Wechselwirkungsbild:

$$H_{int} = - \left[\mathbf{d}_{eg} |e\rangle \langle g| e^{i\omega_0 t} + \mathbf{d}_{eg}^* |g\rangle \langle e| e^{-i\omega_0 t} \right] \cdot \hat{\mathbf{E}}(\mathbf{x}, t) \quad (5.46)$$

Dabei gilt:

$$\hat{\mathbf{E}}(\mathbf{x}, t) = i \int d^3k \sum_{\sigma} \sqrt{\frac{\hbar\omega_k}{2(2\pi)^3\epsilon_0}} e^{i\mathbf{k}\mathbf{x}} e^{-i\omega_k t} \boldsymbol{\epsilon}_{k\sigma} a_{k\sigma} + \text{h. c.} \quad (5.47)$$

Veranschaulichen wir uns die Terme $|e\rangle \langle g| a_{k\sigma}$ und $|e\rangle \langle g| a_{k\sigma}^\dagger$:

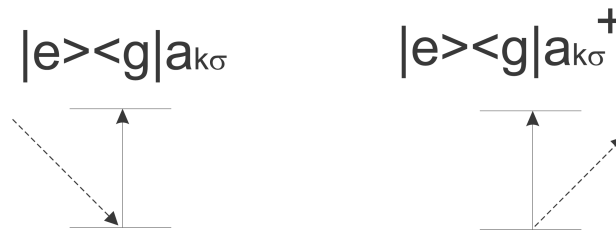


Abbildung 5.6: Der Term auf der rechten Seite ist in gewisser Weise unphysikalisch und wird in der RWA vernachlässigt

Die RWA vernachlässigt also die Prozesse *Absorption & Abregung* sowie *Emission & Anregung*.

Gehen wir (in RWA) wieder in das Schrödinger-Bild:

$$H_{Schroed} = \frac{\hbar\omega_0}{2} \sigma_z + \int d^3k \sum_{\sigma} \hbar\omega_k a_{k\sigma}^\dagger a_{k\sigma} + \hbar \int d^3k \sum_{\sigma} \left[|e\rangle \langle g| a_{k\sigma} g_{k\sigma} + \text{H. c.} \right] \quad (5.48)$$

wobei $g_{k\sigma}$ gegeben ist durch:

$$g_{k\sigma} = -i \mathbf{d}_{eg} \cdot \boldsymbol{\epsilon}_{k\sigma} \sqrt{\frac{\omega_k}{2\hbar(2\pi)^3\epsilon_0}} e^{i\mathbf{k}\mathbf{x}} \quad (5.49)$$

Besonders oft studiert wurde das Modell mit nur einer Photon-Mode, das sog. Jaynes-Cummings-Modell. Für dieses ergibt sich aus Gleichung (5.48)

$$H = \hbar \left(\frac{\omega_0}{2} \sigma_z + \omega_L a^\dagger a + g \sigma^+ a + g^* \sigma^- a^\dagger \right) . \quad (5.50)$$

Hierbei ist σ^\pm definiert durch:

$$\sigma^+ = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \quad \sigma^- = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad (5.51)$$

Dieses Modell ist sinnvoll für den Fall, dass

- nur eine Mode besetzt ist ($n_a \gg n_{k\sigma}$), also im wesentlichen für einen klassischen Laserstrahl
- nur eine Mode in einer Cavity resonant ist.

In der Cavity-Quantenelektrodynamik sind in den letzten 15 Jahren große Fortschritte gemacht worden. Die grundlegende Idee kann an einer idealen Cavity erläutert werden, die aus einem Hohlraum besteht, dessen Wände ideale Spiegel sind. Diese Wände sorgen für Randbedingungen an das elektrodynamische (Quanten-)Feld, wodurch im wesentlichen nur Moden mit der Wellenlänge $\lambda_n = 2L/n$ zugelassen sind. Deren Frequenzen $\omega_n = 2\pi c/\lambda_n \propto n$ sind diskret und sind nur für $\omega_n \approx (E_e - E_g)/\hbar$ mit dem atomaren Übergang resonant, so dass nur Moden für ein bestimmtes n berücksichtigt werden müssen. Um die Größenordnungen zu nennen: bei Mikrowellen benutzt man Resonatoren der Länge $L \approx 1$ cm mit $n \approx 1$, bei Licht dagegen Resonatoren der Länge $L \approx 1 - 10$ cm und $n \approx 10^6 \gg 1$.

Reale Cavities sind nie ideal. Ein Maß für die Güte ist der Qualitätsfaktor Q , der die Anzahl der Durchläufe eines Photons angibt, bis dieses statistisch verloren ist. Für sehr gute Cavities erreicht man $Q \approx 10^6$. Dabei ist nur eine Polarisationsrichtung resonant, da die Spiegel immer aus doppelbrechendem Material sind.

In einer 3d-Cavity wird auch die spontane Emission modifiziert, da das Atom nur in bestimmte Moden emittieren und die emittierten Photonen wieder absorbieren kann.

Dressed States in einer Cavity sind allgemein darstellbar durch

$$|\psi\rangle = \sum_n (\psi_e(n) |e, n\rangle + \psi_g(n) |g, n\rangle) \quad (5.52)$$

Wir suchen die Eigenwerte von $H |\psi\rangle = E |\psi\rangle$. Dies führt uns zu dem Gleichungssystem:

$$(E + \frac{\hbar\omega_0}{2} - n\hbar\omega_L)\psi_g(n) = \hbar g^* \sqrt{n} \psi_e(n-1) \quad (5.53)$$

$$(E - \frac{\hbar\omega_0}{2} - (n-1)\hbar\omega_L)\psi_e(n-1) = \hbar g^* \sqrt{n} \psi_g(n) \quad (5.54)$$

wobei wir für die untere Gleichung $\psi_e(n-1)$ wählen, da dieses an $\psi_g(n)$ koppelt. (Anregung geschieht durch Absorption eines Photons!). Mit den Ersetzungen $\Omega_n := g\sqrt{n}$ und $\Delta = \omega_L - \omega_0$ können wir dieses Gleichungssystem auch schreiben als:

$$\frac{1}{\hbar} \left(E - (n - \frac{1}{2})\hbar\omega_L \right) \begin{pmatrix} \psi_e(n-1) \\ \psi_g(n) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\frac{\Delta}{2} & \Omega_n \\ \Omega_n^* & \frac{\Delta}{2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_e(n-1) \\ \psi_g(n) \end{pmatrix} \quad (5.55)$$

Diese Gleichung ist dieselbe wie beim klassischen EM-Feld. Daher können wir die Eigenwerte sofort ablesen zu:

$$E_{n,\pm} = (n - \frac{1}{2})\hbar\omega_L \pm \hbar \sqrt{\left(\frac{\Delta}{2}\right)^2 + |\Omega_n|^2} \quad (5.56)$$

Die Energien hängen also von n ab, das bedeutet, dass bei einer Superposition von Zuständen mit verschiedenen n die einzelnen Phasenfaktoren ($e^{-iE_{n,\pm}t/\hbar}$) auseinanderlaufen. Dies führt wegen destruktiver Interferenz zu Collapse and Revival der Anregungswahrscheinlichkeit.

Literatur: [5], [6]

5.4 Modelle mit wenigen Niveaus, Dunkelzustände, Raman-Übergänge

Am Gebräuchlichsten ist das Drei-Niveau-Modell. Um zu solch einem System zu gelangen, muss man Laser geeignet einstrahlen. Das schematische Beispiel zeigt Übergänge von $J = 1$ nach $J' = 1$. Hierbei ist der Übergang von J' nach J mit $m = m' = 0$ verboten. Durch Einstrahlen von σ_+ und σ_- -Licht kann man daher das Niveau $m = 0, J = 1$ entvölkern und erhält ein sog. Λ -System aus den Zuständen $|J = 1, m = \pm 1\rangle$ und $|J' = 1, m' = 0\rangle$.

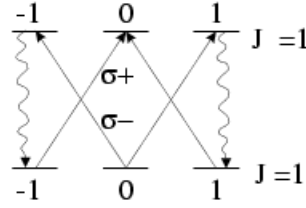


Abbildung 5.7: Die Vektoren bezeichnen die Übergänge, die durch σ_{\pm} -Licht angeregt werden. Die gewellten Linien zeigen zusätzliche mögliche Abregungen durch spontane Emission auf.

Der Hamilton-Operator dieses Systems in RWA ist:

$$\begin{aligned}
 H &= \begin{pmatrix} E_e & \hbar\Omega_+e^{-i\omega_+t} & \hbar\Omega_-e^{-i\omega_-t} \\ \hbar\Omega_+^*e^{i\omega_+t} & E_+ & 0 \\ \hbar\Omega_-^*e^{i\omega_-t} & 0 & E_- \end{pmatrix} \\
 &= E_e\mathbb{1} + \begin{pmatrix} 0 & \hbar\Omega_+e^{-i\omega_+t} & \hbar\Omega_-e^{-i\omega_-t} \\ \hbar\Omega_+^*e^{i\omega_+t} & E_+ - E_e & 0 \\ \hbar\Omega_-^*e^{i\omega_-t} & 0 & E_- - E_e \end{pmatrix} \quad (5.57)
 \end{aligned}$$

Wir führen wieder eine Transformation durch, um die Zeitabhängigkeit zu entfernen:

$$\tilde{\psi}_{\pm} = e^{-i\omega_{\pm}t}\psi_{\pm} \quad (5.58)$$

Dies führt zu dem zeitunabhängigen Hamiltonian

$$H = \hbar \begin{pmatrix} 0 & \Omega_+ & \Omega_- \\ \Omega_+^* & \Delta_+ & 0 \\ \Omega_-^* & 0 & \Delta_- \end{pmatrix} + E_e\mathbb{1} \quad (5.59)$$

wobei wir $\Delta_{\pm} = \omega_{\pm} - \frac{E_e - E_{\pm}}{\hbar}$ gesetzt haben.

5.4.1 Dunkelzustände (Dark States)

Betrachte den Fall der *Zwei-Photonen-Resonanz*: $\Delta_+ = \Delta_-$, dabei bedeutet $\Delta_{\pm} \neq 0$, dass einzelne Photonen nicht resonant mit den Übergängen $|\pm\rangle \rightarrow |e\rangle$ sind. Bei der Zwei-Photonen-Resonanz hat man aber $\hbar(\omega_+ - \omega_-) = E_- - E_+$. Das folgt direkt aus $\Delta_+ = \Delta_-$ wegen

$$\hbar\omega_+ - E_e + E_+ = \hbar\omega_- - E_e + E_-$$

Ist die Bedingung der Zwei-Photonen-Resonanz gegeben, so existiert ein Eigenzustand des Hamiltonians, der *Dunkelzustand* genannt wird:

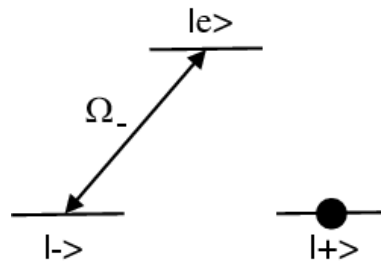
$$|\psi_D\rangle = \frac{\Omega_-}{\Omega} |+\rangle - \frac{\Omega_+}{\Omega} |-\rangle \quad (5.60)$$

mit $\Omega := \sqrt{|\Omega_-|^2 + |\Omega_+|^2}$. Die Wirkung des Hamiltonians auf diesen Zustand ist

$$\begin{aligned} H |\psi_D\rangle &= \hbar \begin{pmatrix} 0 & \Omega_+ & \Omega_- \\ \Omega_+^* & \Delta_+ & 0 \\ \Omega_-^* & 0 & \Delta_- \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ \Omega_-/\Omega \\ -\Omega_+/\Omega \end{pmatrix} \\ &= \hbar \begin{pmatrix} \frac{\Omega_+\Omega_-}{\Omega^2} - \frac{\Omega_-\Omega_+}{\Omega^2} \\ \frac{\Delta_+\Omega_-}{\Omega} \\ \frac{-\Delta_-\Omega_+}{\Omega} \end{pmatrix} = \hbar \Delta \begin{pmatrix} 0 \\ \frac{\Omega_-}{\Omega} \\ -\frac{\Omega_+}{\Omega} \end{pmatrix} \end{aligned}$$

falls $\Delta_+ = \Delta_- = \Delta$. Also ist im Fall der Zwei-Photonen-Resonanz $|\psi_D\rangle$ ein Eigenzustand von H , der keine angeregte Komponente hat. Die Anregungswahrscheinlichkeit ist null, die Atome sind für dieses (!) Lichtfeld transparent.⁴ Die Übergangsamplituden interferieren destruktiv.

Einfacher Spezialfall: $\Omega_+ = 0 \Rightarrow |\psi_D\rangle = |+\rangle$

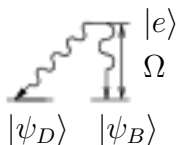


Ändert man die Rabi-Frequenzen, so kann $|\psi_D\rangle$ angeregt werden. Zu $|\psi_D\rangle$ gibt es auch einen entsprechenden gekoppelten Zustand, den Bright State:

$$|\psi_B\rangle = \frac{\Omega_+^*}{\Omega} |+\rangle + \frac{\Omega_-^*}{\Omega} |-\rangle \quad (5.61)$$

Für diesen gilt $H |\psi_B\rangle = \Omega |e\rangle + \Delta |\psi_B\rangle$

$|\psi_D\rangle$ und $|\psi_B\rangle$ bilden eine alternative Basis zu $|+\rangle$, $|-\rangle$. Spontane Emission transferiert im Allgemeinen $|e\rangle$ sowohl in $|\psi_D\rangle$ als auch $|\psi_B\rangle$, da der Dunkelzustand nur für die Photonen der beiden Laserstrahlen dunkel ist und an andere Lichtmoden koppeln kann:



⁴Dies gilt auch, wenn keine Zwei-Photonen-Resonanz vorliegt.

Das kann zum Pumpen in $|\psi_D\rangle$ verwendet werden (siehe Kapitel über Laserkühlung). Für $\Delta_+ \neq \Delta_-$ ist $|\psi_D\rangle$ kein Eigenzustand des Hamiltonians mehr und entwickelt sich mit der Zeit zu $|\psi_B\rangle$, von dem aus das Atom angeregt werden kann. Der Pumpzyklus funktioniert dann nicht mehr.

Die anschauliche Bedeutung der Dunkelzustände kann man am Beispiel eines Überganges mit $J_g = L_g = 1$ nach $J_e = L_e = 0$ verstehen. Dieses Beispiel ist zwar nicht besonders realistisch, da für die meisten Grundzustände der Bahndrehimpuls L_g verschwindet, es erlaubt aber, den Mechanismus hinter Dunkelzuständen im Kern zu verstehen.⁵ Betrachten wir dazu die Form der elektronischen Zustände $|e\rangle = |L_e = m_e = 0\rangle$ und $|m\rangle = |L_g = 1, m_g = m\rangle$ im Ortsraum. Schreibt man die Relativkoordinate des Elektrons in sphärischen Koordinaten,

$$\mathbf{x} = \begin{pmatrix} r \sin \vartheta \cos \varphi \\ r \sin \vartheta \sin \varphi \\ r \cos \vartheta \end{pmatrix}$$

so ergibt sich für die Zustände

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{x} | -1 \rangle &= Y_{1,-1}(\vartheta, \varphi) r f_g(r) \\ &= r e^{-i\varphi} \sin \vartheta f_g(r) = (x - iy) f_g(r) \\ \langle \mathbf{x} | 0 \rangle &= r \cos \vartheta f_g(r) \\ &= z f_g(r) \\ \langle \mathbf{x} | 1 \rangle &= (x + iy) f_g(r) \\ \langle \mathbf{x} | e \rangle &= Y_{0,0} f_e(r) \\ &= f_e(r) \end{aligned}$$

Damit lassen sich die Matrixelemente des Dipolmoments $-e\mathbf{x}$ wie folgt berechnen:

$$\begin{aligned} \mathbf{d}_{e,-1} &= \langle e | -e\mathbf{x} | -1 \rangle \\ &= -e \int d^3x f_e^* f_{-1}(r) (x - iy) \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} \\ &= -e \int d^3x f_e^* f_{-1}(r) \begin{pmatrix} x^2 - ixy \\ xy - iy^2 \\ xz - iyz \end{pmatrix} \end{aligned}$$

aus Symmetriegründen $x \rightarrow -x'$ oder $y \rightarrow -y'$ folgt

$$\mathbf{d}_{e,-1} = -e \int d^3x f_e^*(r) f_{-1} \begin{pmatrix} x^2 \\ -iy^2 \\ 0 \end{pmatrix}$$

⁵In realistischen Atomen hat man z.B. $L_g = 0, S = 1, L_e = 1$ so dass $J_g = 1$ und $J_e = 0$ für eine Λ -Konfiguration. Obwohl hierbei die Bahndrehimpulse genau umgekehrte Werte als in unserem Beispiel haben, sorgen die Auswahlregeln dafür, dass die folgenden Argumente auch auf diesen Fall übertragen werden können.

Da wiederum aus Symmetriegründen $\int f(r)x^2 = \int f(r)y^2$ gilt, findet man $\mathbf{d}_{e,-1} \sim (1, -i, 0)$. Analog kann man zeigen, dass $\mathbf{d}_{e,1} \sim (1, i, 0)$ und $\mathbf{d}_{e,0} \sim (0, 0, 1)$ gilt.

Betrachten wir nun als Beispiel den Fall, dass linear in x -Richtung polarisiertes Licht einstrahlt wird. Wir haben also $\mathbf{E} \sim \mathbf{e}_x$. Wegen

$$\boldsymbol{\epsilon}_+ + \boldsymbol{\epsilon}_- = \frac{1}{\sqrt{2}}(\mathbf{e}_x + i\mathbf{e}_y) + \frac{1}{\sqrt{2}}(\mathbf{e}_x - i\mathbf{e}_y) = \sqrt{2}\mathbf{e}_x$$

ist dies äquivalent dazu, dass wir links- und rechtszirkular polarisiertes Licht mit gleicher Intensität einstrahlen. Für die zugehörigen Rabi-Frequenzen ergibt sich

$$\begin{aligned} \Rightarrow \Omega_+ &= \frac{1}{\hbar} \mathbf{d}_{e,+1} \cdot \mathbf{E} \sim \begin{pmatrix} 1 \\ i \\ 0 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} = 1 \\ \Omega_- &= \frac{1}{\hbar} \mathbf{d}_{e,-1} \cdot \mathbf{E} \sim \begin{pmatrix} 1 \\ -i \\ 0 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} = 1 \\ &\Rightarrow \Omega_+ = \Omega_- \end{aligned}$$

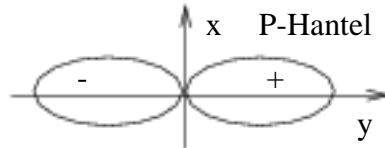
Die Rabi-Frequenzen sind also gleich, so dass sich der Dunkelzustand (5.60) zu

$$|\psi_D\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|+1\rangle - |-1\rangle)$$

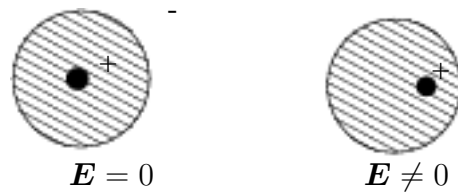
ergibt. Die Ortsdarstellung dieses Zustandes ist

$$\begin{aligned} \psi_D(x) &= \frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_{+1}(x) - \psi_{-1}(x)) \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}}\{(x + iy)f_g(r) - (x - iy)f_g(r)\} \\ &= \sqrt{2}iyf_g(r) \end{aligned} \tag{5.62}$$

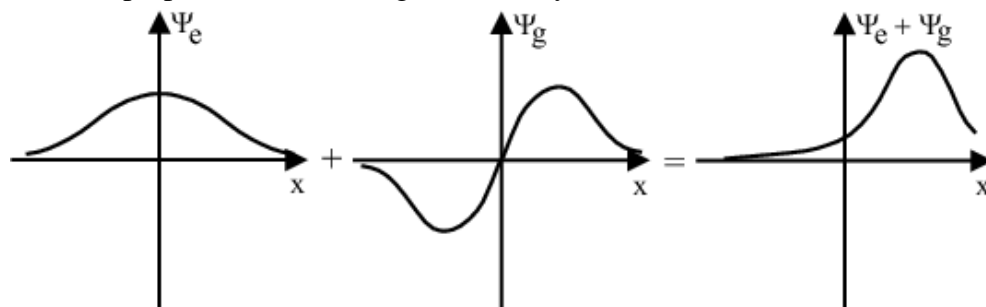
$\Rightarrow \psi_D$ ist antisymmetrisch in y -Richtung, es entspricht einer Hantel entlang y (da es ein p -Zustand ist):



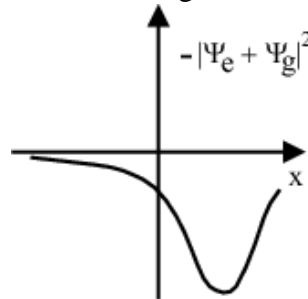
Jetzt wo wir wissen, wie der Dunkelzustand räumlich aussieht, können wir uns die Wechselwirkung des Atoms mit dem Lichtfeld näher anschauen. Die klassische Wechselwirkung eines elektrischen Feldes mit einem Atom besteht darin, dass positive und negative Ladungen gegeneinander verschoben werden, und zwar entlang der Richtung von \mathbf{E} :



Die anfänglich symmetrische Ladungsdichte des Atoms wird dabei asymmetrisch. In der Quantenmechanik ergibt sich ein ähnliches Bild. E erzeugt dann eine Superposition von $|e\rangle$ und $|g\rangle$. In unserem Beispiel ist $|e\rangle$ symmetrisch im Ortsraum und alle drei Grundzustände antisymmetrisch.⁶ Die Superposition ist im Allgemeinen asymmetrisch.



Die Ladungsdichte der Elektronen ist gegeben durch $\varrho(x) = -e|\psi(x)|^2$. Sie ist symmetrisch sowohl für den reinen angeregten Zustand $|e\rangle$ als auch für die drei Grundzustände. Erst die Superposition erzeugt eine asymmetrische Ladungsverteilung:



Die Superposition der Zustände ist also die quantenmechanische Beschreibung der Tatsache, dass die Ladungen im elektrischen Feld gegeneinander verschoben werden.

Für normale Atome findet man für jeden Laserstrahl und sein zugehöriges elektrisches Feld einen p-Zustand, mit dessen Hantel man durch Superposition eine *entlang der elektrischen Feldrichtung* verschobene Ladungsverteilung erzeugen kann. Bei einem Dunkelzustand geht das nicht: in unserem Beispiel zeigt das elektrische Feld entlang der x -Achse, der Dunkelzustand (5.62) ist aber antisymmetrisch in y -Richtung. Sind die Atome also im Dunkelzustand präpariert, so kann das elektrische Feld ihre Ladungsdichte nicht in x -Richtung verschieben.

⁶Es sei noch einmal darauf hingewiesen, dass dies genau umgekehrt ist, wie es bei Atomen normalerweise der Fall ist.

5.4.2 Raman-Übergänge

Betrachte die Zeitentwicklung der Zustände mit

$$H = \hbar \begin{pmatrix} 0 & \Omega_+ & \Omega_- \\ \Omega_+^* & \Delta_+ & 0 \\ \Omega_-^* & 0 & \Delta_- \end{pmatrix} \quad (5.63)$$

$$\begin{aligned} \Rightarrow i\dot{\psi}_e &= \Omega_+ \psi_+ + \Omega_- \psi_- \\ i\dot{\psi}_{\pm} &= \Delta_{\pm} \psi_{\pm} + \Omega_{\pm}^* \psi_e \end{aligned}$$

Ansatz: $\psi_{\pm} = e^{-i\Delta_{\pm}t} \tilde{\psi}_{\pm} \Rightarrow$

$$i\dot{\psi}_e = \Omega_+ e^{-i\Delta_+t} \tilde{\psi}_+ + \Omega_- e^{-i\Delta_-t} \tilde{\psi}_- \quad (5.64)$$

$$i\dot{\tilde{\psi}}_{\pm} = \Omega_{\pm}^* e^{i\Delta_{\pm}t} \psi_e \quad (5.65)$$

Wegen $|\psi_e| \leq 1$ ergibt sich daraus, dass $|\dot{\tilde{\psi}}_{\pm}| \leq |\Omega_{\pm}|$ gilt. Die formale Lösung für ψ_e lautet

$$\psi_e(t) = \underbrace{\psi_e(0)}_{\equiv 0} - i \int_0^t dt' \left\{ \Omega_+ e^{-i\Delta_+t'} \tilde{\psi}_+(t') + \Omega_- e^{-i\Delta_-t'} \tilde{\psi}_-(t') \right\} \quad (5.66)$$

Betrachte den Fall großer Verstimmungen: $|\Delta_{\pm}| \gg |\Omega_{\pm}|$. In diesem Fall variiert $\tilde{\psi}_{\pm}(t)$ langsam gegenüber $e^{-i\Delta_{\pm}t}$, da $|\dot{\tilde{\psi}}_{\pm}| \leq |\Omega_{\pm}| \ll |\Delta_{\pm}|$. Man kann daher unter dem Integral $\tilde{\psi}_{\pm}(t') \approx \tilde{\psi}_{\pm}(t)$ setzen und nur über die schnell variierenden Terme integrieren. Damit folgt

$$\psi_e(t) \approx \frac{\Omega_+}{\Delta_+} (e^{-i\Delta_+t} - 1) \tilde{\psi}_+(t) + \frac{\Omega_-}{\Delta_-} (e^{-i\Delta_-t} - 1) \tilde{\psi}_-(t)$$

Einsetzen in Gl. (5.65) ergibt

$$i\dot{\tilde{\psi}}_{\pm} = \Omega_{\pm}^* e^{i\Delta_{\pm}t} \left\{ \frac{\Omega_+}{\Delta_+} (e^{-i\Delta_+t} - 1) \tilde{\psi}_+(t) + \frac{\Omega_-}{\Delta_-} (e^{-i\Delta_-t} - 1) \tilde{\psi}_-(t) \right\}$$

oder ausmultipliziert für eine Komponente

$$i\dot{\tilde{\psi}}_+ = \frac{|\Omega_+|^2}{\Delta_+} \underbrace{(1 - e^{i\Delta_+t})}_{\approx 1} \tilde{\psi}_+(t) + \frac{\Omega_+^* \Omega_-}{\Delta_-} \underbrace{(e^{i(\Delta_+ - \Delta_-)t} - e^{i\Delta_+t})}_{\approx e^{i(\Delta_+ - \Delta_-)t}} \tilde{\psi}_-(t)$$

wobei schnell variierende Terme sich wegmitteln und deshalb gegenüber langsamen Termen vernachlässigt werden können.⁷ Zusammengefasst kann man daher eine effektive Zwei-Niveau-Gleichung für die beiden Grundzustände formulieren:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \begin{pmatrix} \tilde{\psi}_+ \\ \tilde{\psi}_- \end{pmatrix} = H_{\text{eff}} \begin{pmatrix} \tilde{\psi}_+ \\ \tilde{\psi}_- \end{pmatrix} \quad (5.67)$$

⁷Im Gegensatz dazu hatten wir in Gl. (5.65) ausschließlich schnell variierende Terme, so dass wir sie dort nicht vernachlässigen durften.

mit

$$H_{\text{eff}} = \hbar \begin{pmatrix} \frac{|\Omega_+|^2}{\Delta_+} & \frac{\Omega_+^* \Omega_-}{\Delta_-} e^{i(\Delta_+ - \Delta_-)t} \\ \frac{\Omega_-^* \Omega_+}{\Delta_+} e^{-i(\Delta_+ - \Delta_-)t} & \frac{|\Omega_-|^2}{\Delta_-} \end{pmatrix} \quad (5.68)$$

Der stets nur schwach besetzte angeregte Zustand tritt hier nicht mehr auf. Man nennt dies *adiabatische Eliminierung des angeregten Zustandes*.

Die Matrixelemente von H_{eff} sind proportional zu Ω^2/Δ . Dieser Ausdruck kann auch für kleine Anregungswahrscheinlichkeiten $P_e = \Omega^2/\Delta^2$ groß sein. Aus dieser Tatsache folgt die große praktische Bedeutung von Raman-Übergängen, denn eine geringe Anregungswahrscheinlichkeit bedeutet, dass spontane Emission und der damit verbundene Kohärenzverlust der Wellenfunktion stark unterdrückt ist. Man kann daher Atome mit Raman-Übergängen kohärent manipulieren. Die Zeitskala des Kohärenzverlustes (Dekohärenz) ist die Anregungswahrscheinlichkeit multipliziert mit der spontanen Emissionsrate, γP_e . Typisches Zahlenbeispiel: $\Omega = 10^9$ Hz, $\gamma = 10^7$ Hz, $\Delta = 10^{10}$ Hz. Damit folgt $\Omega^2/\Delta = 10^8$ Hz und $\gamma P_e = 10^5$ Hz.

Die *effektive Rabi-Frequenz*

$$\Omega_{\text{eff}} := \frac{\Omega_+^* \Omega_-}{\Delta} \quad (5.69)$$

bestimmt die Kopplung zwischen den beiden Grundzuständen. Hierbei ist der Index \pm an der Verstimmung bewusst weggelassen worden, denn es ergibt sich folgendes Problem.

H_{eff} ist nicht mehr hermitesch, da im Allgemeinen $\Delta_- \neq \Delta_+$ ist. Warum kann man diesen Operator dennoch verwenden? Der Grund liegt darin, dass die adiabatische Entwicklung des angeregten Zustands

$$\psi_e = \frac{\Omega_+}{\Delta_+} \tilde{\psi}_+ (e^{-i\Delta_+ t} - 1) + \frac{\Omega_-}{\Delta_-} \tilde{\psi}_- (e^{-i\Delta_- t} - 1) \quad (5.70)$$

als Entwicklung von ψ_e nach Potenzen von $\frac{1}{\Delta_{\pm}}$ angesehen werden kann. ψ_e ist korrekt bis zur ersten Ordnung in $\frac{1}{\Delta_{\pm}}$, sofern alle Frequenzen Ω_{\pm} , $\Delta_+ - \Delta_- \ll \Delta_{\pm}$ sind. Daher muss man folgende Entwicklung machen:

$$\begin{aligned} \frac{1}{\Delta_-} &= \frac{1}{(\Delta_- - \Delta_+) + \Delta_+} \\ &\approx \frac{1}{\Delta_+} - \frac{1}{\Delta_+^2} (\Delta_- - \Delta_+) + \dots \end{aligned} \quad (5.71)$$

$$= \frac{1}{\Delta_+} + O\left(\frac{1}{\Delta_+^2}\right) \quad (5.72)$$

H_{eff} ist also hermitesch bis zur ersten Ordnung in $\frac{1}{\Delta_{\pm}}$. Führt man nun die effektive Rabi-Frequenz nach (5.69) ein, so kann man H_{eff} durch

$$H_{\text{eff}} = \hbar \begin{pmatrix} * & \Omega_{\text{eff}} e^{i(\Delta_+ - \Delta_-)t} \\ \Omega_{\text{eff}}^* e^{-i(\Delta_+ - \Delta_-)t} & * \end{pmatrix} \quad (5.73)$$

darstellen. Dieser Hamiltonian ist analog dem des Zwei-Niveau-Systems.

5.5 Adiabatisches Theorem, STIRAP

Die **STImulated Rapid Adiabatic Passage** ist eine Methode, Dunkelzustände und Raman-Übergänge hocheffizient miteinander zu kombinieren. Sie benutzt das

Adiabatische Theorem: Gegeben sei ein zeitabhängiger Hamiltonian $H(t)$ mit Eigenzuständen $|n(t)\rangle$, $H(t)|n(t)\rangle = E_n(t)|n(t)\rangle$. Ein Zustand $|\psi(t)\rangle$ folgt adiabatisch dem Zustand $|n(t)\rangle$, falls $H(t)$ (unendlich) langsam variiert ($\dot{H}/H \rightarrow 0$). Dann gilt:

$$|\psi(t)\rangle = e^{i\phi(t)} |n(t)\rangle \quad (5.74)$$

Den exakten Beweis führen wir an dieser Stelle nicht, aber der Satz soll im Folgenden motiviert werden:

Zu lösen ist $i\hbar\partial_t |\psi(t)\rangle = H(t) |\psi(t)\rangle$ mit $|\psi(0)\rangle = |n(0)\rangle$. Dazu macht man den Ansatz

$$|\psi(t)\rangle = \sum_n c_n(t) |n(t)\rangle \quad (5.75)$$

Dies in die Schrödinger-Gleichung eingesetzt ergibt:

$$\begin{aligned} i\hbar\partial_t |\psi\rangle &= i\hbar \sum_n \{\dot{c}_n |n\rangle + c_n |\dot{n}\rangle\} \\ &= H |\psi\rangle \\ &= \sum_n E_n(t) c_n(t) |n(t)\rangle \end{aligned} \quad (5.76)$$

Multipliziert man diese Gleichung von links mit $\langle m(t)|$, so ergibt sich unter der Voraussetzung $\langle m(t)|n(t)\rangle = \delta_{nm}$:

$$i\dot{c}_m + i \sum_n c_n \langle m|\dot{n}\rangle = \frac{E_m}{\hbar} c_m \quad (5.77)$$

Ansatz für die Koeffizienten $c_m(t)$:

$$c_m(t) = \exp\left(-i \int_0^t dt' E_m(t')/\hbar\right) \cdot \tilde{c}_m(t) \quad (5.78)$$

Es ergibt sich für $\dot{\tilde{c}}_m$:

$$\dot{\tilde{c}}_m = - \sum_n \tilde{c}_n \langle m|\dot{n}\rangle \exp\left(-i \int_0^t dt' (E_n(t') - E_m(t'))/\hbar\right) \quad (5.79)$$

Variiert H langsam, so wird $\langle m|\dot{n}\rangle$ klein gegen den Phasenfaktor $\int (E_m - E_n)$, falls $m \neq n$. Man kann dann diese Terme vernachlässigen und erhält:

$$\dot{\tilde{c}}_m \approx - \langle m|\dot{m}\rangle \tilde{c}_m \quad (5.80)$$

Wegen

$$\langle m|\dot{m}\rangle = -\langle \dot{m}|m\rangle = -(\langle m|\dot{m}\rangle)^* \quad (5.81)$$

folgt, dass $\langle m|\dot{m}\rangle = i\alpha(t)$ eine rein komplexe Zahl sein muss. Somit gilt:

$$\tilde{c}_m(t) = \exp\left(-i \int_0^t \alpha(t') dt'\right) \quad (5.82)$$

Anmerkung: die Phase $\int \alpha(t) dt$ wird *Berry-Phase* genannt und hat eine geometrische Bedeutung: im Hilbertraum bekommt man, wenn man einen geschlossenen Weg langsam oder schnell durchläuft, immer dieselbe Phasendifferenz, da die Berry-Phase invariant unter einer Reparametrisierung der Zeit ist.

5.5.1 Anwendung des adiabatischen Theorems auf Dunkelzustände

$$|\psi_D\rangle = \frac{\Omega_-}{\Omega} |+\rangle - \frac{\Omega_+}{\Omega} |-\rangle \quad (5.83)$$

mit

$$\Omega = \sqrt{|\Omega_+|^2 + |\Omega_-|^2} \quad (5.84)$$

Mache die Rabi-Frequenzen zeitabhängig und verändere sie adiabatisch, $\Omega_{\pm} = \Omega_{\pm}(t)$. Dies führt dann zu:

$$|\psi_D\rangle = |\psi_D(T)\rangle \quad (5.85)$$

Falls der Anfangszustand der Atome durch $|\psi(0)\rangle = |\psi_D(0)\rangle$ gegeben ist, dann folgt $|\psi(t)\rangle$ adiabatisch dem Dunkelzustand, $|\psi(t)\rangle = |\psi_D(T)\rangle$. Genau dies ist das Prinzip von STIRAP. Man kann dadurch Atome mit hoher Effizienz zwischen den beiden Grundzuständen transferieren. Im Einzelnen macht man das wie folgt:

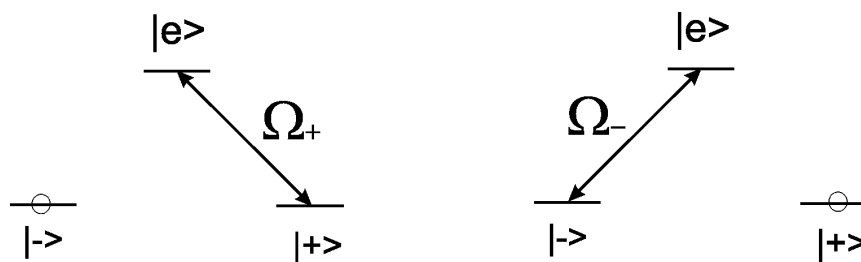


Abbildung 5.8: Links Anfangszustand, rechts Endzustand. Der Kreis markiert den Dunkelzustand

- $|\psi(0)\rangle = |-\rangle = |\psi_D\rangle$ mit $\Omega_-(0) = 0$
- Verändere Ω_+ und Ω_- so, dass $\Omega_+(t_1) = 0$

- Dann ist $|\psi(t_1)\rangle = |+\rangle = |\psi_D(t_1)\rangle$ mit $\Omega_+(t_1) = 0$.

Diese Abfolge entspricht einer kontraintuitiven Abfolge von Laserpulsen, bei der zuerst der nicht koppelnde Laserstrahl angeschaltet wird.

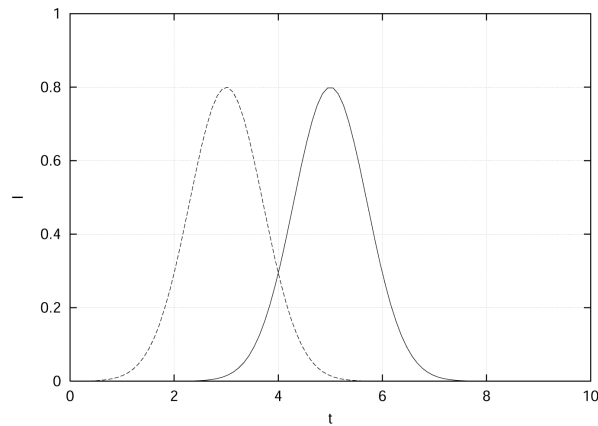


Abbildung 5.9: Der erste Puls entspricht Ω_+ , der zweite Ω_- .

Die STIRAP hat eine maximale Effizienz von 99% und darüber. Dabei bleiben die Atome immer in einer Superposition von $|-\rangle$ und $|+\rangle$ ($|\psi_D\rangle$), obwohl die Zustände $|+\rangle$ und $|-\rangle$ nur über $|e\rangle$ gekoppelt sind. Im Idealfall findet ein Transfer von $|-\rangle$ nach $|+\rangle$ statt, ohne dass die Atome jemals angeregt sind.

Kapitel 6

Atomoptik

Die Atomoptik behandelt allgemein die kohärente Propagation atomarer Materiewellen. Hauptaugenmerk wird also auf Schwerpunktbewegung der Atome gelegt. In dieser Vorlesung wird der Einfluß von Licht auf die Schwerpunktbewegung behandelt.

6.1 Grundlegendes Prinzip

In Kap. 3 behandelten wir, dass der vollständige atomare Hamiltonian aus Relativ- und Schwerpunktbewegungsbeiträgen besteht:

$$H = \frac{\mathbf{p}^2}{2M} + \underbrace{\sum_n E_n |n\rangle \langle n|}_{=H_0} \quad (6.1)$$

wobei H_0 die Relativbewegung der Elektronen beschreibt ($|n\rangle = 1s, 2p \dots$), p der Schwerpunktimпульsoperator und M die Gesamtmasse des Atoms ist.

Die Kopplung an ein elektromagnetisches Feld ist in der Dipolnäherung nach Abschnitt 4.3 gegeben durch:

$$H_{int} = -\frac{1}{\varepsilon_0} \mathbf{d} \cdot \mathbf{D}(\mathbf{x}) - \boldsymbol{\mu} \cdot \mathbf{B}(\mathbf{x}) \quad (6.2)$$

Dabei sind $\mathbf{d}, \boldsymbol{\mu}$ Operatoren, die auf die Relativbewegung wirken, \mathbf{x} ist der Schwerpunkt des Atoms. Die Heisenbergschen Bewegungsgleichungen liefern:

$$\dot{\mathbf{x}} = -\frac{i}{\hbar} [\mathbf{x}, H + H_{int}] = \frac{1}{M} \mathbf{P} \quad (6.3)$$

$$\dot{\mathbf{P}} = -\frac{i}{\hbar} [\mathbf{P}, H_{int}] = \nabla \left\{ -\frac{1}{\varepsilon_0} \mathbf{d} \cdot \mathbf{D}(\mathbf{x}) - \boldsymbol{\mu} \cdot \mathbf{B}(\mathbf{x}) \right\} \quad (6.4)$$

Inhomogene Felder ändern also die Schwerpunktbewegung. Dabei hängt die Änderung vom inneren Zustand ab (z.B. Stern-Gerlach)

Besonders intuitiv zu verstehen ist die Absorption/Emission einzelner Photonen mit Polarisation ϵ und Wellenvektor \mathbf{k} . Der Photonenimpuls ergibt sich zu:

$$\mathbf{p}_\gamma = \hbar \mathbf{k} \quad (6.5)$$

Aus der Impulserhaltung folgt:

$$|\mathbf{p}, g\rangle \otimes |1_k\rangle \longrightarrow |\mathbf{p} + \hbar \mathbf{k}, e\rangle \otimes |0\rangle \quad (6.6)$$

Beispiel: laufende Laser-Welle mit Wellenvektor \mathbf{k}_L

$$H_{int} = -\mathbf{d} \cdot \mathbf{E}(\mathbf{x}) \quad \mathbf{E} = \mathbf{E}_0 e^{i\mathbf{k}_L \mathbf{x}} \quad (6.7)$$

Hieraus ergibt sich

$$\Omega = -\frac{\mathbf{d}_{eg} \cdot \mathbf{E}}{\hbar} = \Omega_0 e^{i\mathbf{k}_L \mathbf{x}} \quad (6.8)$$

Für ein Zwei-Niveau-System gilt dann:

$$H = \frac{\mathbf{p}^2}{2M} \mathbf{1} + \begin{pmatrix} -\hbar\Delta & \\ & 0 \end{pmatrix} + \hbar \begin{pmatrix} 0 & \Omega_0 e^{i\mathbf{k}_L \mathbf{x}} \\ \Omega_0 e^{-i\mathbf{k}_L \mathbf{x}} & 0 \end{pmatrix} \quad (6.9)$$

Man verwendet folgende Zusammenhänge

$$|\psi_e\rangle = \int d^3p |\mathbf{p}\rangle \psi_e(\mathbf{p}), \text{ analog } |\psi_g\rangle \quad (6.10)$$

$$\text{mit } e^{i\mathbf{k}_L \mathbf{x}} |\mathbf{p}\rangle = |\mathbf{p} + \hbar \mathbf{k}_L\rangle \quad (6.11)$$

Die letzte Gleichung erhält man am einfachsten, wenn man die Orstdarstellung der Impulseigenzustände verwendet: $\langle \mathbf{x} | \mathbf{p} \rangle \propto \exp(i\mathbf{p} \cdot \mathbf{x} / \hbar)$. Man setzt dies in die Schrödinger-Gleichung ein

$$i\hbar \partial_t \begin{pmatrix} |\psi_e\rangle \\ |\psi_g\rangle \end{pmatrix} = H \begin{pmatrix} |\psi_e\rangle \\ |\psi_g\rangle \end{pmatrix} \quad (6.12)$$

und erhält:

$$i\hbar \partial_t \begin{pmatrix} \psi_e(\mathbf{p} + \hbar \mathbf{k}_L) \\ \psi_g(\mathbf{p}) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \left[\frac{(\mathbf{p} + \hbar \mathbf{k}_L)^2}{2M} - \hbar\Delta \right] \psi_e(\mathbf{p} + \hbar \mathbf{k}_L) + \hbar\Omega_0 \psi_g(\mathbf{p}) \\ \frac{\mathbf{p}^2}{2M} \psi_g(\mathbf{p}) + \hbar\Omega_0^* \psi_e(\mathbf{p} + \hbar \mathbf{k}_L) \end{pmatrix} \quad (6.13)$$

Das ist nun wieder ein 2-Niveau-System der Form $\begin{pmatrix} \psi_e(\mathbf{p} + \hbar \mathbf{k}_L) \\ \psi_g(\mathbf{p}) \end{pmatrix}$.

Wichtig: der Impulsübertrag ändert die Verstimmung:

$$\begin{aligned} \tilde{E}_e - \tilde{E}_g &= \left[\frac{(\mathbf{p} + \hbar \mathbf{k}_L)^2}{2M} - \hbar\Delta \right] - \frac{\mathbf{p}^2}{2M} \\ &= -\hbar\Delta + \frac{\hbar}{M} \mathbf{p} \cdot \mathbf{k}_L + \frac{\hbar^2 \mathbf{k}_L^2}{2M} \end{aligned} \quad (6.14)$$

Hieraus erkennt man, wenn man $\mathbf{v} = \frac{1}{M}\mathbf{p}$ anwendet und einmal durch $-\hbar$ dividiert:

$$\Delta(\mathbf{v}) = \Delta - \mathbf{v} \cdot \mathbf{k}_L - \frac{\hbar \mathbf{k}_L^2}{2M} \quad (6.15)$$

Hierbei ist $-\mathbf{v} \cdot \mathbf{k}_L$ die Doppler-Verschiebung der Laserfrequenz im Ruhesystem des Atoms, $\frac{\hbar \mathbf{k}_L^2}{2M}$ stellt den recoil-shift (Rückstoßverschiebung) dar.

6.2 Atom-Interferometrie

Atom-Interferometrie wird seit 1991 (Carnal & Mlynek [38]) betrieben. Wir beschäftigen uns hier nur mit Interferometern, die Lichtstrahlen als Atomstrahlteiler verwenden.

Das Grundprinzip ist allen Licht-Atom-Interferometern gleich: Licht wird verwendet, um Atome zu „kicken“.

6.2.1 Ramsey-Bordé-Interferometer (Bordé 1988, Riehle 1991)

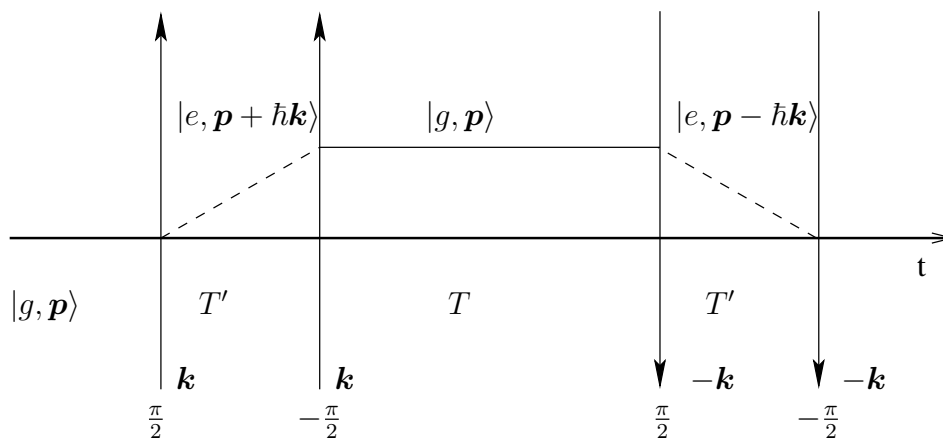


Abbildung 6.1: Das Atom-Interferometer von Ramsey und Bordé

Die Atome ändern also nicht nur ihren internen Zustand sondern auch ihren Impuls. Sie durchlaufen in diesem Interferometer (siehe Abbildung 6.1) also räumlich unterschiedliche Bahnen [36, ?]. Tatsächlich wurde ein solcher Aufbau auch schon vor 1991 verwendet, allerdings nicht zur Interferometrie, sondern als Spektrometer.

Funktionsweise:

1. Der erste Laserstrahl bewirkt einen idealen $\frac{\pi}{2}$ Puls mit Impulsübertrag $\hbar \mathbf{k}$,

$$|g, \mathbf{p}\rangle \rightarrow \frac{1}{\sqrt{2}}(|g, \mathbf{p}\rangle + |e, \mathbf{p} + \hbar \mathbf{k}\rangle) = |\psi_1\rangle$$

2. Freie Propagation für die Zeit T' ,

$$|\psi_1\rangle \rightarrow \frac{1}{\sqrt{2}}(|g, \mathbf{p}\rangle + |e, \mathbf{p} + \hbar\mathbf{k}\rangle \exp(i\Delta E(\mathbf{p}, \mathbf{k})T'/\hbar)) = |\psi_2\rangle$$

$$\text{mit } \Delta E(\mathbf{p}, \mathbf{k}) = E_e - E_g + \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2M} + \frac{\hbar}{M} \mathbf{p} \cdot \mathbf{k}$$

3. Der zweite Laserstrahl bewirkt einen idealen $\frac{\pi}{2}$ Puls mit Impulsübertrag $\hbar\mathbf{k}$,

$$|\psi_2\rangle \rightarrow \frac{1}{2} \left(|g, \mathbf{p}\rangle (1 - e^{i\Delta E(\mathbf{p}, \mathbf{k})T'/\hbar}) + |e, \mathbf{p} + \hbar\mathbf{k}\rangle (1 + e^{i\Delta E(\mathbf{p}, \mathbf{k})T'/\hbar}) \right) = |\psi_3\rangle$$

Die Abhängigkeit $\Delta E(\mathbf{p}, \mathbf{k})$ vom atomaren Impuls verhindert, dass bereits das Signal nach dem zweiten Laserpuls sinnvoll für die Interferometrie verwendet werden kann. Der Grund ist, dass Atome mit unterschiedlichem Impuls verschiedene Phasenverschiebungen erfahren und somit das Gesamtsignal verwaschen wird. Um dieses Problem zu lösen, verwendet man das zweite Pulspaar in Abbildung 6.1. Nehmen wir an, dass die Zeit T zwischen den Pulspaares lang gegenüber der Zerfallszeit der angeregten Atome ist. In diesem Fall können wir in $|\psi_3\rangle$ den angeregten Anteil vernachlässigen. Außerdem soll während der Flugzeit T irgendein äußeres Potential¹ eine Phasenverschiebung $\exp(i\alpha)$ zwischen den beiden Armen des Atominterferometers erzeugen, so dass der Zustand zum Zeitpunkt $T + T'$ proportional zu

$$|\psi_4\rangle = |g, \mathbf{p}\rangle (e^{i\alpha} - e^{i\Delta E(\mathbf{p}, \mathbf{k})T'/\hbar})$$

ist. Die Anwendung des zweiten Laserpuls-Paares kann völlig analog zum ersten Paar berechnet werden. Man findet dann für den Zustand nach dem zweiten Laserpuls

$$\langle g | \psi(2T' + T) \rangle \propto (e^{i\alpha} - e^{i\Delta E(\mathbf{p}, \mathbf{k})T'/\hbar})(1 - e^{i\Delta E(\mathbf{p}, -\mathbf{k})T'/\hbar}).$$

Man kann am Ausgang des Interferometers beispielsweise die Wahrscheinlichkeit dafür messen, Atome im Grundzustand zu finden. Diese ist durch $|\langle g | \psi(2T' + T) \rangle|^2$ gegeben und lautet explizit

$$e^{i\alpha} (-e^{-i\Delta E(\mathbf{p}, \mathbf{k})T'/\hbar} e^{-i\Delta E(\mathbf{p}, -\mathbf{k})T'/\hbar} + e^{-i(\Delta E(\mathbf{p}, \mathbf{k}) + \Delta E(\mathbf{p}, -\mathbf{k}))T'/\hbar}) + \text{c.c.} + \text{Rest}.$$

Mittelt man über verschiedene Impulse, so fallen alle Terme, die noch von \mathbf{p} abhängen, heraus. Es überlebt nur der letzte Term. In diesem wird für jedes Atom genau die entgegengesetzte impulsabhängige Phasenverschiebung akkumuliert, so dass insgesamt jedes Atom dieselbe totale Phasenverschiebung erfährt und man diese messen kann. Man bezeichnet dieses Interferometer daher als *Doppler-frei*. Es bleibt dann nur noch die Rückstoßverschiebung, die jedoch für jedes Atom dieselbe ist und einfach herausgerechnet werden kann.

Offensichtlich schließen die Interferometerarme eine Fläche ein. Das Ramsey-Interferometer ist Doppler-frei, d. h. die Phase, die durch die Doppler-Verschiebung verursacht wird, fällt heraus (siehe Übung).

¹Z.B. die Schwerkraft. Da Atome, die den Impulsübertrag erfahren haben, etwas höher weiterfliegen als die, die im Grundzustand bleiben, durchlaufen sie ein anderes Gravitationspotential.

Ein großer Nachteil besteht darin, dass über die Zeit T' Atome im angeregten Zustand existieren. Hier kann durch spontane Emission die Interferenzfähigkeit zerstört werden. Für „normale“ Atome und optische Übergänge liegt die Zerfallszeit bei $\approx 10^7 \text{ s}^{-1}$. Die Teilchen erhalten durch den ursprüngliche Puls (Wellenzahl von $k \approx 10^7 \text{ m}^{-1}$ (Licht)) eine Geschwindigkeit von $v = \frac{\hbar k}{M} \approx 1 \text{ cm/s}$. Sie kommen so innerhalb der Zerfallszeit rund 1 nm weit. Eine solch kleine Aufspaltung ist kaum meßbar.

Um spontane Emission zu vermeiden, muß $T' \ll 1/\gamma$ (γ : Zerfallswahrscheinlichkeit) sein. Man wählt daher langlebige (metastabile) Zustände mit $\gamma \approx 10^3 \text{ s}^{-1}$. Für diese Niveaus sind elektrische Dipolübergänge verboten, sie werden z.B. mittels Quadrupolübergängen angeregt.

6.2.2 Atomic fountain (Kasevich & Chu 1991)

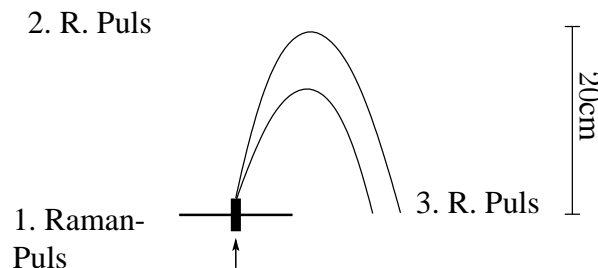


Abbildung 6.2: Grundprinzip des Interferometers

Der Vorteil gegenüber dem Ramsey-Bordé-Interferometer besteht darin, dass durch die Verwendung von Raman-Pulsen die Atome praktisch die ganze Zeit über im Grundzustand bleiben [37]: dadurch sind sehr lange Laufzeiten (bis zu 0.25 s) erreichbar.

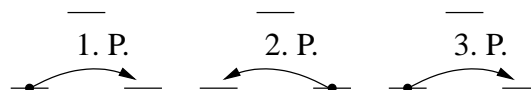


Abbildung 6.3: Durch die Raman-Pulse induzierte Übergänge

Mit dieser Apparatur wurde die Erdbeschleunigung auf 10^{-8} genau gemessen, sie ist so empfindlich, dass Höhenunterschiede des Aufbaus im cm Bereich (und die dadurch verursachte Änderung der Erdbeschleunigung) gemessen werden können.

Funktionsweise: Unter einem Raman $\frac{\pi}{2}$ -Puls versteht man einen Raman-Übergang mit der effektiven Rabi-Frequenz

$$\Omega_{eff} = \frac{\Omega_+^*(\mathbf{x})\Omega_-(\mathbf{x})}{\Delta}, \quad (6.16)$$

der für eine Zeit t angeschaltet bleibt, die

$$t \cdot |\Omega_{eff}| \approx \frac{\pi}{4}$$

erfüllt. Ein solcher Puls überführt das System in eine Superposition von $|+\rangle$ und $|-\rangle$. Wählt man nun für

$$\Omega_{\pm}(\mathbf{x}) = \Omega_0 e^{i\mathbf{k}_{\pm} \cdot \mathbf{x}} \quad \text{dann gilt: } \Omega_{eff} = \frac{\Omega_0^2}{\Delta} e^{i(\mathbf{k}_- - \mathbf{k}_+) \cdot \mathbf{x}} \quad (6.17)$$

Was gerade einem effektiven Zwei-Niveau-System entspricht. Der Impulsübertrag ist damit gegeben durch:

$$\Delta \mathbf{p} = \hbar(\mathbf{k}_- - \mathbf{k}_+) \quad \text{analog zum Zwei-Niveau-System} \quad (6.18)$$

Anschaulich entspricht dies der Absorption eines Photons aus Ω_- und der stimulierten Emission in Ω_+ . Es gibt nun verschiedene realisierbare Systeme:

parallele Laser: $\mathbf{k}_+ = \mathbf{k}_- \Rightarrow \Delta \mathbf{p} = 0$

gegenläufige Laser: $\mathbf{k}_+ = -\mathbf{k}_- \Rightarrow \Delta \mathbf{p} = 2\hbar\mathbf{k}_-$ also doppelt so viel wie im Ramsey-Bordé-Interferometer.

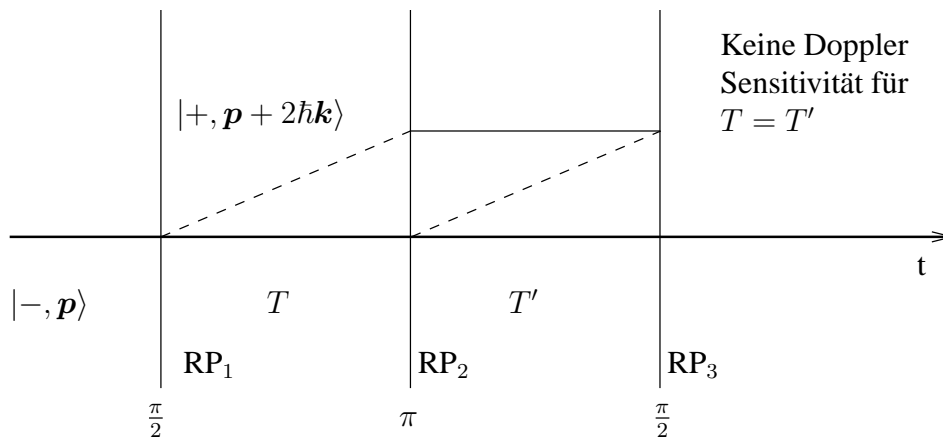


Abbildung 6.4: Das Atom-Interferometer von Kasevich und Chu

6.3 Optische Potentiale

Idee der optischen Potentiale: Nutze die Ortsabhängigkeit von $\Omega(\mathbf{x})$ aus. Zur Vermeidung der spontanen Emission wird eine große Verstimmung gewählt (dies entspricht der adiabatischen Eliminierung des angeregten Zustandes, siehe Gl. 5.68).

Z. B. .

Das optische Potential ist dabei durch

$$V_{opt}(\mathbf{x}) = \hbar \frac{|\Omega(\mathbf{x})|^2}{\Delta} \quad (6.19)$$

gegeben. Die Form des Potentials wird also durch den Laser bestimmt.

6.3.1 Laufender Laser mit Gauß-Profil

$$\mathbf{E}^{(+)}(\mathbf{x}) = e^{ikz} e^{-\frac{\varrho^2}{w^2}} \boldsymbol{\epsilon} E_0 \quad \text{mit: } \varrho = \sqrt{x^2 + y^2} \quad (6.20)$$

Die Rabi-Frequenz ergibt sich dann als

$$\Omega(\mathbf{x}) = \frac{1}{\hbar} \mathbf{d} \cdot \mathbf{E}^{(+)} = \Omega_0 e^{ikz} e^{-\frac{\varrho^2}{w^2}} \quad (6.21)$$

$$\text{Also } V_{opt} = \frac{\Omega_0^2}{\Delta} e^{-2\frac{\varrho^2}{w^2}} \quad (6.22)$$

Für $\Delta > 0$ streben die Atome zu den Orten geringster Lichtintensität („low-field-seekers“), für

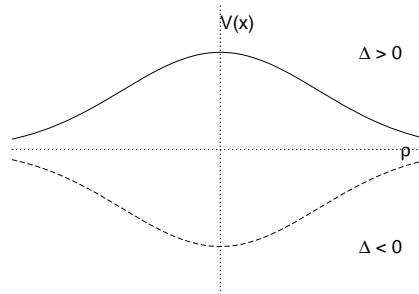


Abbildung 6.5: Optisches Potential eines Lasers mit gaußförmiger Intensitätsverteilung

$\Delta < 0$ zum den Intensitätsmaximum („high-field-seekers“). Für $\Delta < 0$ stellt das System also eine Atomfalle dar. Typische Parameter für BEC-Fallen sind

$$\Omega \approx 7 \cdot 10^{10} \text{ s}^{-1}$$

$$\Delta \approx 10^{15} \text{ s}^{-1}$$

$$P_{Laser} = 2 \text{ W}$$

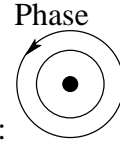
auf $30 \mu\text{m}$ fokussiert

Dies ergibt ein optisches Potential von etwa $V_0 = 5 \cdot 10^{-28} \text{ J}$. Damit gelingt es, Teilchen, die eine Temperatur von $\frac{V_0}{k_B} \approx 40 \mu\text{K}$ besitzen, einzufangen. Typischerweise ist die Kondensattemperatur kleiner als $1 \mu\text{K}$. Die Dekohärenzrate eines solchen Systems liegt bei $\gamma \cdot \frac{|\Omega|^2}{\Delta^2} \approx 5 \cdot 10^{-2} \text{ s}^{-1}$, ist also sehr langsam. Sie ist das Produkt der Anregungswahrscheinlichkeit $|\Omega|^2/\Delta^2$ und der spontanen Emissionsrate und gibt an, in welcher Zeitskala eine den Zustand zerstörende spontane Emission stattfindet.

6.3.2 Stehender Doughnut-Laser

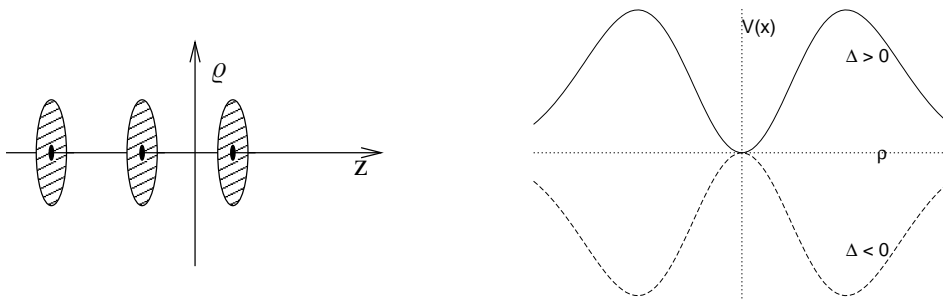
$$\mathbf{E}^{(+)}(\mathbf{x}) = \cos(kz) e^{-\frac{\varrho^2}{w^2}} (x + iy) \mathbf{E}_0 \quad (6.23)$$

Wobei $x + iy = \varrho e^{i\phi}$ gilt; ein solcher Laser sieht in etwa wie folgt aus:
Es gilt also



$$\Omega = \Omega_0 \cos(kz)(x + iy)e^{-\frac{\varrho^2}{w^2}} \quad \text{und} \quad (6.24)$$

$$V = \frac{\Omega_0^2}{\Delta} \cos^2(kz)\varrho^2 e^{-2\frac{\varrho^2}{w^2}} \quad (6.25)$$



d. h. der Laser bildet eine „Röhre“ für Atome, die sich am Minimum ansammeln (für blau verstimmt Licht).

6.3.3 Evaneszente Lichtfelder

(Übung)

6.3.4 Linsen für einen Atomstrahl

Ein realer Laserstrahl hält seinen Fokus nur über einen gewissen Bereich hinweg ²:

$$\mathbf{E}^{(+)}(\mathbf{x}) = e^{ikz} \frac{\mathbf{E}_0}{q(z)} e^{ik\varrho^2/(2q(z))} \quad q(z) = z - iz_0 \quad (6.26)$$

Wobei z_0 die Rayleigh-Länge bezeichnet, die die Breite über $w_0 := \sqrt{\frac{2z_0}{\pi}}$ bestimmt. Das optische Potential ist in diesem Fall

$$V_{opt} \propto |\mathbf{d} \cdot \mathbf{E}^{(+)}|^2 = V_0 \left(\frac{w_0}{w(z)} \right)^2 e^{-\frac{\varrho^2}{w^2}} \quad \text{mit: } w(z) = w_0 \sqrt{1 + (z/z_0)^2} \quad (6.27)$$

²Das i im Exponenten ist kein Druckfehler. Diese Form für das elektrische Feld ergibt sich in der sogenannten Paraxial-Näherung, die in Büchern über Optik oder in meinem Skript zur Elektrodynamik behandelt wird.

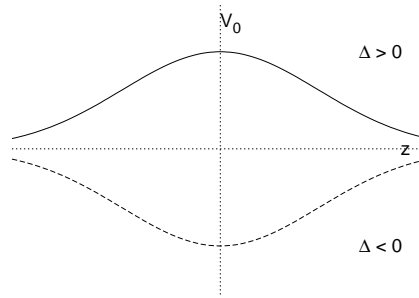
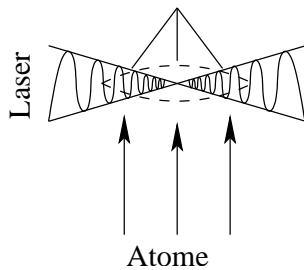


Abbildung 6.6: Rayleigh-Länge und Breite



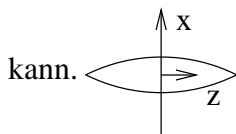
Die Berechnung einer solchen Linse gelingt mittels der Raman-Nath-Näherung: Wenn die Wechselwirkungszeit T zwischen Licht und Atomen so kurz ist, dass sich die Dichteverteilung der Atome kaum ändert, kann man $\frac{P^2}{2M}$ im Hamilton Operator vernachlässigen.

$$\psi(x, t) = U(t)\psi_0(x) = e^{-iHt/\hbar}\psi_0(x) \approx e^{-iV(x)t/\hbar}\psi_0(x) \quad (6.28)$$

Es ändert sich also nur die Phase der Wellenfunktion. Danach propagiert der Zustand frei, d. h.

$$\psi(x, t) = e^{-i\frac{p^2}{2M}\frac{t}{\hbar}}\psi_0(x, T) \quad (6.29)$$

1-dimensionales Beispiel: Der Lichtstrahl läuft in z -Richtung und hat eine gewisse Breite, der Atomstrahl passiert den Lichtstrahl in x -Richtung. Die Atome haben dadurch nur eine kurze Wechselwirkungszeit mit dem Laser, so dass die Raman-Nath-Näherung angewendet werden ges.: Impulsänderung in z -Richtung



$$\psi_0(z) = e^{-\frac{z^2}{w_1^2}} \Rightarrow \psi(z, T) \approx e^{-\frac{z^2}{w_1^2}} e^{-iTRz^2} \quad (6.30)$$

$$e^{-\left(\frac{1}{w_1^2} + iTR\right)z^2} \quad (6.31)$$

wobei wir das Potential durch

$V(x) \approx Rz^2$ angenähert haben (wegen der näherungsweise quadratischen Abhängigkeit des optischen Potentials um $z = 0$). Die Zeitentwicklung dieser Wellenfunktion läßt sich am einfachsten mittels einer Fourier-Transformation angeben:

$$\psi(z, t) = \mathcal{F}^{-1}\left(e^{-\frac{p^2}{2M}\frac{t}{\hbar}}\mathcal{F}(\psi(z, T))\right) \quad (6.32)$$

$$\Rightarrow \psi(z, t) \propto e^{-\frac{z^2}{4\beta}}$$

$$\text{mit: } \beta = \frac{1}{4\alpha} + i\frac{t\hbar}{2M} \text{ und } \alpha = \frac{1}{w_1^2} + iTRz$$

Also

$$w^4(t) = |4\beta|^2 = (at - (w_1^2 + T^2 R^2 z))^2 + \text{const.} \quad \text{mit: } a = \frac{2\hbar}{m}$$

D. h. $w(t)$ besitzt ein Minimum für $t > 0$, was einer Fokussierung entspricht.

Kapitel 7

Inkohärente Wechselwirkung und Dichtematrix

7.1 Dichtematrix-Formalismus

Die Dichtematrix $\hat{\varrho}$ erlaubt es, die Zeitentwicklung inkohärenter Systeme (an Stelle reiner Zustände) zu beschreiben. Insbesondere ermöglicht sie auch die Beschreibung offener Quantensysteme.

Ein Beispiel: Ein (klassischer) Apparat im Labor produziert einen Quantenzustand nur mit einer gewissen klassischen Wahrscheinlichkeit bei jeder Durchführung des Experiments. Dies kann beispielsweise ein Ofen sein, bei dem Atome mal mit Geschwindigkeit v_1 , mal mit v_2 ausgestoßen werden.

Man weiß daher nur mit einer Wahrscheinlichkeit p_i , ob der Zustand $|\psi_i\rangle$ realisiert wurde. Die $|\psi_i\rangle$ müssen dabei nicht orthogonal sein. Die Wahrscheinlichkeiten müssen natürlich $\sum_i p_i = 1$ erfüllen, da irgendein Zustand mit Sicherheit vorliegt. Jedes $|\psi_i\rangle$ entwickelt sich danach (geschlossenes System, kein Reservoir) unitär gemäß $|\psi_i(t)\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar}Ht} |\psi_i(0)\rangle$. Falls bei einer Realisierung des Experiments der Zustand $|\psi_i\rangle$ vorliegt, so ist der Mittelwert einer Observable für diesen Zustand gegeben durch

$$\langle \hat{A} \rangle_i = \langle \psi_i(t) | \hat{a} | \psi_i(t) \rangle \quad (7.1)$$

$|\psi_i\rangle$ liegt bei jeder Realisierung mit Wahrscheinlichkeit p_i vor. Man gewinnt den vollständigen Erwartungswert durch die Mittelung über alle Realisierungen,

$$\langle \hat{A} \rangle = \sum_i p_i \langle \hat{A} \rangle_i = \sum_i p_i \langle \psi_i(t) | \hat{a} | \psi_i(t) \rangle \quad (7.2)$$

Ist $\{|n\rangle\}$ eine Orthonormalbasis des Hilbertraumes, dann läßt sich die $\mathbf{1}$ als $\sum_n |n\rangle\langle n|$ darstellen. Damit gilt für den Erwartungswert:

$$\langle \hat{A} \rangle = \sum_i p_i \langle \psi_i | \sum_n |n\rangle\langle n| \hat{A} | \psi_i \rangle = \sum_n \langle n | \hat{A} \sum_i p_i | \psi_i \rangle \langle \psi_i | n \rangle = \sum_n \langle n | \hat{A} \hat{\varrho} | n \rangle \quad (7.3)$$

Die *Dichtematrix* $\hat{\varrho}$ definiert man über

$$\hat{\varrho} = \sum_i p_i |\psi_i\rangle\langle\psi_i| \quad (7.4)$$

Der Erwartungswert eines Operators ist die Spur über diesen und die Dichtematrix:

$$\langle\hat{A}\rangle = \text{Tr}(\hat{\varrho}\hat{A}) \quad (7.5)$$

Eigenschaften der Spur

(i) Die Spur hängt nicht von der Basis ab.

(ii) $\text{Tr}(\hat{A}\hat{B}) = \text{Tr}(\hat{B}\hat{A})$

Beweis:

zu (i) Sei $\{|n'\rangle\}$ eine andere Basis des Hilbertraumes. Dann ist

$$\begin{aligned} \text{Tr}(\hat{A}) &= \sum_n \langle n|\hat{A}|n\rangle = \sum_n \langle n| \sum_{n'} |n'\rangle \langle n'|\hat{A}|n\rangle \\ &= \sum_{n'} \langle n'|\hat{A} \underbrace{\sum_n |n\rangle\langle n|}_{1} n'\rangle = \sum_{n'} \langle n'|\hat{A}|n'\rangle \end{aligned}$$

zu (ii)

$$\begin{aligned} \text{Tr}(\hat{A}\hat{B}) &= \sum_n \langle n|\hat{A}\hat{B}|n\rangle = \sum_{n,n'} \langle n|\hat{A}|n'\rangle \langle n'|\hat{B}|n\rangle \\ &= \sum_{n,n'} \langle n'|\hat{B}|n\rangle \langle n|\hat{A}|n'\rangle = \sum_{n'} \langle n'|\hat{B}\hat{A}|n'\rangle \end{aligned}$$

Eigenschaften der Dichtematrix

(i) $\hat{\varrho}$ ist hermitesch.

(ii) $\text{Tr} \hat{\varrho} = 1$

(iii) $\text{Tr}(\hat{\varrho}^2) \leq 1$ ($= 1$ für reine Zustände)

Beweis:

zu (i) trivial wegen $p_i \in [0, 1]$

zu (ii)

$$\begin{aligned}\mathrm{Tr} \hat{\varrho} &= \sum_{n,i} \langle n | p_i | \psi_i \rangle \langle \psi_i | n \rangle = \sum_i p_i \langle \psi_i | \sum_n | n \rangle \langle n | \psi_i \rangle \\ &= \sum_i p_i \underbrace{\langle \psi_i | \psi_i \rangle}_1 = \sum_i p_i = 1\end{aligned}$$

zu (iii)

$$\begin{aligned}\mathrm{Tr} (\hat{\varrho}^2) &= \sum_n \langle n | \sum_{ij} p_i p_j | \psi_i \rangle \langle \psi_i | p_j | \psi_j \rangle \langle \psi_j | n \rangle = \sum_{i,j} p_i p_j \langle \psi_i | \psi_j \rangle \langle \psi_j | \psi_i \rangle \\ &= \sum_{i,j} p_i p_j \underbrace{|\langle \psi_i | \psi_j \rangle|^2}_{\leq 1} \leq \sum_i p_i \sum_j p_j = 1\end{aligned}$$

Bei einem *reinen Zustand* gilt:

$$\hat{\varrho} = |\psi\rangle \langle \psi|, \quad \hat{\varrho}^2 = \hat{\varrho}$$

Ein *Gemisch* hat mindestens zwei verschiedene Zustände:

$$\hat{\varrho} = p_1 |\psi_1\rangle \langle \psi_1| + p_2 |\psi_2\rangle \langle \psi_2| + \dots, \quad p_i \neq 0$$

Der Unterschied zwischen Gemisch und Superposition wird an folgendem Beispiel deutlich: $\hat{\varrho}_G$ beschreibt ein Gemisch:

$$\hat{\varrho}_G = \frac{1}{2}(|e\rangle \langle e| + |g\rangle \langle g|)$$

Die Hälfte der Atome ist angeregt, die andere Hälfte ist im Grundzustand. In diesem Zustand soll der Erwartungswert des Dipol-Operators, $\mathbf{d} \propto |e\rangle \langle g| + |g\rangle \langle e|$, gebildet werden.

$$\begin{aligned}\langle \mathbf{d} \rangle &\propto \mathrm{Tr} (\hat{\varrho}_G (|e\rangle \langle g| + |g\rangle \langle e|)) = \frac{1}{2} \mathrm{Tr} (|g\rangle \langle e| + |e\rangle \langle g|) \\ &= \frac{1}{2} \langle e | \dots | e \rangle + \frac{1}{2} \langle g | \dots | g \rangle = 0\end{aligned}$$

$\hat{\varrho}_S$ beschreibt eine Superposition:

$$\begin{aligned}|\psi\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}(|e\rangle + |g\rangle) \\ \hat{\varrho}_S &= |\psi\rangle \langle \psi| = \frac{1}{2}(|e\rangle + |g\rangle)(\langle g| + \langle e|) \\ &= \underbrace{\frac{1}{2}(|g\rangle \langle g| + |e\rangle \langle e|)}_{\hat{\varrho}_G} + \frac{1}{2}(|e\rangle \langle g| + |g\rangle \langle e|)\end{aligned}$$

$\hat{\varrho}_s$ hat nichtdiagonale Elemente, sogenannte Kohärenzen. Der Erwartungswert des Dipol-Operators ist:

$$\begin{aligned}\langle \mathbf{d} \rangle &\propto \text{Tr}(\hat{\varrho}_s(|e\rangle\langle g| + |g\rangle\langle e|)) = \text{Tr}((\hat{\varrho}_G + \frac{1}{2}(|e\rangle\langle g| + |g\rangle\langle e|))(|e\rangle\langle g| + |g\rangle\langle e|)) \\ &= 0 + \frac{1}{2} \text{Tr}(\underbrace{(|e\rangle\langle e| + |g\rangle\langle g|)}_{\mathbf{1}}) = 1\end{aligned}$$

Die nichtdiagonalen Elemente der Dichtematrix beschreiben den Grad an quantenmechanischer Kohärenz, also die Fähigkeit des Systems, Interferenzeffekte zu zeigen. Sie werden deshalb oft *Kohärenzen* genannt. Die Diagonalelemente enthalten die Population der Zustände.

7.2 Liouville-Gleichung, Superoperatoren

Man betrachte die Zeitentwicklung von $\hat{\varrho}$ im abgeschlossenen System. Ein einzelner Zustand erfüllt bekanntlich die Schrödinger-Gleichung:

$$i\hbar\partial_t |\psi_i\rangle = H |\psi_i\rangle$$

Dies kann man auf die Dichtematrix übertragen:

$$\begin{aligned}i\hbar\partial_t\hat{\varrho} &= i\hbar \sum_i p_i \partial_t(|\psi_i\rangle\langle\psi_i|) = i\hbar \sum_i p_i (\partial_t |\psi_i\rangle \langle\psi_i| + |\psi_i\rangle \partial_t \langle\psi_i|) \\ &= \sum_i p_i (H |\psi_i\rangle\langle\psi_i| - |\psi_i\rangle\langle\psi_i| H)\end{aligned}$$

$$\boxed{i\hbar\partial_t\hat{\varrho} = [H, \hat{\varrho}]} \quad (7.6)$$

Dies ist die Liouville-Gleichung für geschlossene Systeme.

Die Spur der Dichtematrix ist zeitlich konstant:

$$i\hbar\partial_t \text{Tr} \hat{\varrho} = \text{Tr}([H, \hat{\varrho}]) = \text{Tr}(H\hat{\varrho} - \hat{\varrho}H) = 0$$

$[H, \cdot]$ ist ein Spezialfall sogenannter Superoperatoren, die ihrerseits auf Operatoren wirken.

$$\mathcal{L}\hat{\varrho} := [H, \hat{\varrho}]$$

nennt man *Liouville-Superoperator*. Nun muß die Liouville-Gleichung $i\hbar\partial_t\hat{\varrho} = \mathcal{L}\hat{\varrho}$ gelöst werden. Dies geschieht zunächst formal:

$$\begin{aligned}\hat{\varrho}(t) &= e^{-\frac{i}{\hbar}t\mathcal{L}}\hat{\varrho}(0) = (1 - \frac{i}{\hbar}t\mathcal{L} - \frac{t^2}{2!\hbar^2}\mathcal{L}\mathcal{L} + \dots)\hat{\varrho}(0) \\ &= \hat{\varrho}(0) - \frac{it}{\hbar}[H, \hat{\varrho}(0)] - \frac{t^2}{2!\hbar^2}[H, [H, \hat{\varrho}(0)]] + \dots = e^{-\frac{i}{\hbar}Ht}\hat{\varrho}(0)e^{\frac{i}{\hbar}Ht}\end{aligned}$$

Beweis:

$$\begin{aligned}
 f(t) &:= e^{-\frac{it}{\hbar}\mathcal{L}}\widehat{\varrho}(0) \rightarrow i\hbar\partial_t f = \mathcal{L}f = [H, f] \\
 g(t) &:= e^{-\frac{i}{\hbar}Ht}\widehat{\varrho}(0)e^{\frac{i}{\hbar}Ht} \\
 &\text{zu zeigen: } f(t) = g(t) \\
 i\hbar\partial_t g &= i\hbar\left(-\frac{i}{\hbar}Hg + \frac{i}{\hbar}gH\right) = [H, g] \\
 f(t) \text{ und } g(t) &\text{ erfüllen die gleiche Differentialgleichung.} \\
 f(0) &= \widehat{\varrho}(0) = g(0) \\
 f(t) \text{ und } g(t) &\text{ erfüllen die gleichen Anfangsbedingungen.} \\
 &\rightarrow f(t) = g(t)
 \end{aligned}$$

Entropie, Gleichgewichts-Dichtematrix (Exkurs stat. Mechanik)

Die Entropie eines Quantensystems ist wie folgt definiert:

$$S = -k_B \text{Tr}(\widehat{\varrho} \ln \widehat{\varrho}) = -k_B \langle \ln \widehat{\varrho} \rangle \quad (7.7)$$

S beschreibt den Grad an Unordnung, der in einem System herrscht.

In (7.7) wird der Logarithmus der Dichtematrix gebildet. Allgemein ist eine Funktion $f(\widehat{A})$ eines Operators in seiner Diagonaldarstellung am besten definiert.

$$\widehat{A}|a_n\rangle = a_n|a_n\rangle \rightarrow \widehat{A} = \sum_n a_n|a_n\rangle\langle a_n|$$

Für hermitesche Operatoren gilt: $\langle a_n|a_m\rangle = \delta_{nm}$

f sollte Taylor-entwickelbar sein:

$$\begin{aligned}
 f(\widehat{A}) &= \sum_l \frac{f_l}{l!} \widehat{A}^l \\
 \widehat{A}^2 &= \sum_n a_n|a_n\rangle\langle a_n| \sum_m a_m|a_m\rangle\langle a_m| = \sum_n a_n^2|a_n\rangle\langle a_n|
 \end{aligned}$$

Dies läßt sich auf beliebige Potenzen erweitern:

$$\begin{aligned}
 \widehat{A}^l &= \sum_n a_n^l|a_n\rangle\langle a_n| \\
 \Rightarrow f(\widehat{A}) &= \sum_l \frac{f_l}{l!} \sum_n a_n^l|a_n\rangle\langle a_n| = \sum_n f(a_n)|a_n\rangle\langle a_n| \quad (7.8)
 \end{aligned}$$

Als Beispiel folgt die Entropie des reinen Zustandes:

$$\begin{aligned}
 \widehat{\varrho} &= 1 \cdot |\psi\rangle\langle\psi| \\
 S &= -k_B \text{Tr}(\widehat{\varrho} \ln \widehat{\varrho}) = -k_B \text{Tr}(1 \cdot |\psi\rangle\langle\psi| \cdot \underbrace{\ln(1)}_{=0} |\psi\rangle\langle\psi|)
 \end{aligned}$$

Die Entropie des reinen Zustandes ist 0.

Für Gleichgewichtszustände gilt:

$$\dot{\hat{\rho}} = 0 \Leftrightarrow [\hat{H}, \hat{\rho}] = 0$$

$\Rightarrow \hat{\rho}$ hat gemeinsamen Satz von Eigenwerten mit \hat{H}

$$H |E_n\rangle = E_n |E_n\rangle$$

$$\Rightarrow \hat{\rho} = \sum_n \varrho_n |E_n\rangle \langle E_n|$$

Thermischer Gleichgewichtszustand: maximiere Entropie S mit den Nebenbedingungen:

- $\text{Tr}(\hat{\rho}) = 1$ (Erhaltung der Wahrscheinlichkeit)
- $\langle \hat{H} \rangle = E$ (Kanonische oder großkanonische Gesamtheit)

Führe dazu zwei Lagrange-Parameter λ_1, λ_2 ein. Maximierung:

$$\frac{\partial}{\partial \varrho_n} \left(S - \lambda_1 (\text{Tr}(\hat{\rho}) - 1) - \lambda_2 (\langle \hat{H} \rangle - E) \right) = 0$$

Da $\hat{\rho}$ in dieser Basis diagonal ist, gilt somit:

$$\frac{\partial}{\partial \varrho_n} \left\{ -k_B \sum_{n'} \varrho_{n'} \ln \varrho_{n'} - \lambda_1 \left(\sum_{n'} \varrho_{n'} - 1 \right) - \lambda_2 \left(\sum_{n'} \varrho_{n'} E_{n'} - E \right) \right\} = 0$$

$$\Rightarrow 0 = -k_B (\ln \varrho_n + 1) - \lambda_1 - \lambda_2 E_n$$

$$\Rightarrow \varrho_n = \exp \left\{ -\frac{1}{k_B} (\lambda_1 + \lambda_2 E_n) \right\}$$

$$\sim e^{-\frac{\lambda_2}{k_B} E_n}$$

λ_1 wird fixiert durch $\sum_n \varrho_n = 1$

$$\Rightarrow \hat{\rho} \sim \sum_n e^{-\frac{\lambda_2}{k_B} E_n} |E_n\rangle \langle E_n|$$

fasse dies als Funktion von H auf

$$\hat{\rho} \sim e^{-\frac{\lambda_2}{k_B} H}$$

Setze $\lambda_2 = \frac{1}{T} \Rightarrow \hat{\rho} = \frac{1}{Z} e^{-\beta \hat{H}}, \beta = \frac{1}{k_B T}, Z = \text{Tr} \left(e^{-\beta \hat{H}} \right)$

Liouville-Theorem Die Entropie eines Systems ändert sich nicht, wenn man eine unitäre Transformation auf die Dichtematrix anwendet.

$$\hat{\rho}' = U \hat{\rho} U^\dagger$$

$$S' = -k_B \text{Tr} (\hat{\rho}' \ln \hat{\rho}') = S(\hat{\rho}') = S(U \hat{\rho} U^\dagger)$$

Taylor-Entwicklung des Operators innerhalb der Spur:

$$\hat{K}(\hat{\rho}') := \hat{\rho}' \ln \hat{\rho}' = \sum_n K_n \hat{\rho}'^n = \sum_n K_n (U \hat{\rho} U^\dagger)^n$$

Werte den Term in der Klammer aus

$$\begin{aligned} (U \hat{\rho} U^\dagger)^n &= U \hat{\rho} \underbrace{U^\dagger U}_1 \hat{\rho} U^\dagger U \hat{\rho} U^\dagger \dots \\ &= U \hat{\rho}^n U^\dagger \end{aligned}$$

$$\Rightarrow \hat{K}(\hat{\rho}') = U \sum K_n \hat{\rho}^n U^\dagger$$

$$\begin{aligned} \Rightarrow S' &= -k_B \text{Tr} (U \hat{\rho} \ln \hat{\rho} U^\dagger) \\ &= -k_B \text{Tr} (U^\dagger U \hat{\rho} \ln \hat{\rho}) = S \end{aligned}$$

\Rightarrow Die Entropie kann durch keine Zeitentwicklung $U = \exp(-iHt/\hbar)$ in einem geschlossenen System verändert werden. Will man also die Entropie eines Systems ändern, so darf es sich nicht um ein geschlossenes System handeln. Durch die Wechselwirkung mit der Umgebung kann das System Energie, Impuls oder Teilchen austauschen und so z.B. gekühlt werden.

7.3 Reduzierte Dichtematrix, Zwanzigs Master-Gleichung

Direkte Produkte von Hilbert-Räumen Betrachte zwei Hilbert-Räume $\mathcal{H}_S, \mathcal{H}_R$ mit den Basen $\{|S_n\rangle\}, \{|R_\alpha\rangle\}$. Das direkte Produkt dieser Räume ist gegeben durch

$$\mathcal{H}_S \otimes \mathcal{H}_R = \left\{ |\psi\rangle \left| \begin{array}{l} |\psi\rangle = \sum_{n,\alpha} \psi_{n\alpha} |S_n\rangle \otimes |R_\alpha\rangle \end{array} \right. \right\}$$

Dieser Raum enthält nicht nur Zustände, die in Produktform $|S_n\rangle \otimes |R_\alpha\rangle$ geschrieben werden können, sondern auch so genannte *verschränkte Zustände*, z.B.

$$|S_1\rangle \otimes |R_1\rangle + |S_2\rangle \otimes |R_2\rangle$$

Verschränkte Zustände spielen eine zentrale Rolle bei vielen modernen Forschungsgebieten (Bell-Ungleichungen, Quanten-Kryptographie, Quanten-Teleportation, Quantum-Computing usw.). Ihre besondere Eigenschaft besteht darin, dass Korrelationen zwischen den beiden Systemen R und

S bestehen, die praktisch nicht mit klassischen Modellen verstanden werden können. Mehr dazu kann man in Referenz [18] erfahren.

Sei $\hat{\varrho}$ die Dichtematrix auf $\mathcal{H}_S \otimes \mathcal{H}_R$. Der Erwartungswert einer Observablen, die nur auf \mathcal{H}_S wirkt, ist $\langle \hat{A}_S \rangle = \text{Tr} \left(\hat{\varrho} \left(\hat{A}_S \otimes \mathbb{1}_R \right) \right)$. Hier ist unter \hat{A}_S ein Operator zu verstehen, der nur auf dem Hilbert-Raum \mathcal{H}_S wirkt:

$$\hat{A}_S : \mathcal{H}_S \rightarrow \mathcal{H}_S : |S_n\rangle \mapsto \hat{A}_S |S_n\rangle$$

$\hat{A}_S \otimes \mathbb{1}_R$ ist die Darstellung dieses Operators auf dem Produkt-Hilbert-Raum mit der Wirkung

$$\hat{A}_S \otimes \mathbb{1}_R : \mathcal{H}_S \otimes \mathcal{H}_R \rightarrow \mathcal{H}_S \otimes \mathcal{H}_R$$

$$|S_n\rangle \otimes |R_\alpha\rangle \mapsto \hat{A}_S |S_n\rangle \otimes \mathbb{1}_R |R_\alpha\rangle$$

7.3.1 Reduzierte Dichtematrix, Projektions-Superoperatoren

Die Spur eines Operators im Produkt-Raum kann damit zerlegt werden gemäß:

$$\text{Tr}(\hat{O})_{\mathcal{H}_S \otimes \mathcal{H}_R} = \sum_{n,\alpha} (\langle S_n | \otimes \langle R_\alpha |) \hat{O} (|S_n\rangle \otimes |R_\alpha\rangle)$$

\Rightarrow

$$\begin{aligned} \langle \hat{A}_S \rangle &= \sum_{n,\alpha} \langle S_n | \otimes \langle R_\alpha | \hat{\varrho} (\hat{A}_S \otimes \mathbb{1}_R) |S_n\rangle \otimes |R_\alpha\rangle \\ &= \sum_n \langle S_n | \sum_\alpha \langle R_\alpha | \hat{\varrho} |R_\alpha\rangle \hat{A}_S |S_n\rangle \\ &= \sum_n \langle S_n | \text{Tr}_R(\hat{\varrho}) \hat{A}_S |S_n\rangle \end{aligned}$$

Im letzten Schritt wurde verwendet, dass ein Operator der auf dem einen Teilraum wirkt, im anderen Teilraum keine Wirkung hat.

$$\text{Tr}_R(\hat{\varrho}) \equiv \sum_\alpha \langle R_\alpha | \hat{\varrho} |R_\alpha\rangle$$

Nenne

$$\boxed{\hat{\varrho}_S = \text{Tr}_R(\hat{\varrho})}$$

reduzierte Dichtematrix.

$\hat{\varrho}_S$ wirkt auf \mathcal{H}_S , insbesondere gilt:

$$\langle \hat{A}_S \rangle = \text{Tr}_S(\hat{\varrho}_S \hat{A}_S) = \text{Tr}_S(\text{Tr}_R(\hat{\varrho}) \hat{A}_S)$$

Die reduzierte Dichtematrix enthält also die volle Information über das Verhalten einer Observablen im Subsystem \mathcal{H}_S .

Ziel: Finde eine Gleichung, die $\hat{\varrho}_S$ alleine beschreibt.

Projektions-Superoperatoren Normale Projektionsoperatoren \hat{P} in der Quantenmechanik, wie zum Beispiel $P = |e\rangle\langle e|$ mit $P|\psi\rangle = |e\rangle\langle e|\psi\rangle$, erfüllen $P^2 = P$, $P^\dagger = P$

Für den Projektions-Superoperator gilt analog für die Wirkung auf Operatoren:

$$\mathcal{P}^2 \hat{A} = \mathcal{P} \hat{A}$$

Beispiele:

1. Reduzierte Dichtematrix

$$\mathcal{P} \hat{\varrho} \equiv \hat{\varrho}_R(0) \text{Tr}_R(\hat{\varrho}), \quad (7.9)$$

wobei $\hat{\varrho}_R(0)$ der Dichtematrix des Reservoirs zur Zeit $t = 0$ entspricht

$$\begin{aligned} \mathcal{P}^2 \hat{\varrho} &= \hat{\varrho}_R(0) \text{Tr}_R(\mathcal{P} \hat{\varrho}) \\ &= \hat{\varrho}_R(0) \text{Tr}_R(\hat{\varrho}_R(0) \underbrace{\text{Tr}_R(\hat{\varrho})}_{\hat{\varrho}_S: \mathcal{H}_S \mapsto \mathcal{H}_S}) \end{aligned}$$

\Rightarrow

$$\mathcal{P}^2 \hat{\varrho} = \hat{\varrho}_R(0) \text{Tr}_R(\hat{\varrho}_R(0)) \hat{\varrho}_S = \mathcal{P} \hat{\varrho}$$

2. Projektion auf die Populationen

$$\mathcal{P} \hat{\varrho} \equiv \sum_n |n\rangle \langle n| \hat{\varrho} |n\rangle \langle n|$$

\mathcal{P} projiziert $\hat{\varrho}$ auf seine Diagonalelemente, damit werden also alle Kohärenzen zerstört.

7.3.2 Zwanzigs Master-Gleichung

Zwanzigs Master-Gleichung ist eine Gleichung für $\mathcal{P} \hat{\varrho}$ alleine, die aus der Liouville-Gleichung

$$i\hbar \dot{\varrho} = \mathcal{L} \varrho$$

für $\hat{\varrho}$ abgeleitet wird. Zur Herleitung führen wir zunächst den zu \mathcal{P} komplementären Projektions-Superoperator $\mathcal{Q} := 1 - \mathcal{P}$ ein, wobei $\mathcal{Q}^2 = \mathcal{Q}$ erfüllt ist.¹ Der Projektions-Superoperator ist zeitunabhängig, $\dot{\mathcal{P}} = 0$,

$$\begin{aligned} \Rightarrow i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \mathcal{P} \varrho &= \mathcal{P} \mathcal{L} \varrho = \mathcal{P} \mathcal{L} (\mathcal{P} + \mathcal{Q}) \varrho \\ \Rightarrow i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \mathcal{P} \varrho &= \mathcal{P} \mathcal{L} \mathcal{P} \varrho + \mathcal{P} \mathcal{L} \mathcal{Q} \varrho \end{aligned}$$

analog mit $\mathcal{Q} \varrho$

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \mathcal{Q} \varrho = \mathcal{Q} \mathcal{L} \mathcal{P} \varrho + \mathcal{Q} \mathcal{L} \mathcal{Q} \varrho \quad (7.10)$$

¹Hier ist die Unterscheidung zwischen Projektions-Operatoren und Projektions-Superoperatoren wichtig: für Projektionsoperatoren gilt: $|\psi\rangle = \begin{pmatrix} P|\psi\rangle \\ Q|\psi\rangle \end{pmatrix}$, dagegen gilt für Super-Operatoren: $\hat{A} = \begin{pmatrix} \mathcal{P}\hat{A}\mathcal{P} & \mathcal{P}\hat{A}\mathcal{Q} \\ \mathcal{Q}\hat{A}\mathcal{P} & \mathcal{Q}\hat{A}\mathcal{Q} \end{pmatrix}$

Löse zunächst $i\hbar\dot{Q} = \mathcal{Q}\mathcal{L}\mathcal{Q}$. Sind die Super-Operatoren zeitunabhängig, so kann man die formale Lösung leicht hinschreiben:

$$\mathcal{Q}_\varrho(t) = \exp(-i\mathcal{Q}\mathcal{L}\mathcal{Q}t/\hbar)\mathcal{Q}_\varrho(0) .$$

Der allgemeine Fall ist bedeutend komplizierter und führt auf ein sogenanntes zeitgeordnetes Exponential. Da dieses *sehr* häufig in der Quantenfeldtheorie und anderen Bereichen der theoretischen Physik auftritt, soll es hier kurz vorgestellt werden.

Das zeitgeordnete Exponential

Formale Lösung:

$$i\hbar \int_0^t \dot{\mathcal{Q}} dt = \int_0^t \mathcal{Q}\mathcal{L}(t')\mathcal{Q}_\varrho(t') dt' \quad (7.11)$$

$$\Rightarrow \mathcal{Q}_\varrho(t) = \mathcal{Q}_\varrho(0) - \frac{i}{\hbar} \int_0^t \mathcal{Q}\mathcal{L}(t')\mathcal{Q}\mathcal{Q}_\varrho(t') dt' \quad (7.12)$$

wobei im letzten Schritt $\mathcal{Q}^2 = \mathcal{Q}$ verwendet wurde. Diese Lösung ist nur formal, da sie sich praktisch selbst wieder enthält: $\mathcal{Q}_\varrho(t)$ hängt von $\mathcal{Q}_\varrho(t')$ mit $t' < t$ ab. Drückt man $\mathcal{Q}_\varrho(t')$ wieder mit Hilfe von Gleichung (7.12) aus, so ergibt sich

$$\mathcal{Q}_\varrho(t) = \mathcal{Q}_\varrho(0) - \frac{i}{\hbar} \int_0^t dt' (\mathcal{Q}\mathcal{L}(t')\mathcal{Q}) \left\{ \mathcal{Q}_\varrho(0) - \frac{i}{\hbar} \int_0^{t'} dt'' \mathcal{Q}\mathcal{L}(t'')\mathcal{Q}\mathcal{Q}_\varrho(t'') \right\} \quad (7.13)$$

Iteriere dieses Verfahren:

$$\begin{aligned} \Rightarrow \mathcal{Q}_\varrho(t) = & \mathcal{Q}_\varrho(0) - \frac{i}{\hbar} \int_0^t dt' (\mathcal{Q}\mathcal{L}(t')\mathcal{Q})\mathcal{Q}_\varrho(0) \\ & + \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^2 \int_0^t dt' \int_0^{t'} dt'' (\mathcal{Q}\mathcal{L}\mathcal{Q}(t'))(\mathcal{Q}\mathcal{L}\mathcal{Q}(t''))\mathcal{Q}_\varrho(0) + \dots \end{aligned} \quad (7.14)$$

Führe das *zeitgeordnete Produkt* ein:

$$T(A(t)B(t')) := \begin{cases} A(t)B(t') & \text{für } t > t' \\ B(t')A(t) & \text{für } t' > t \end{cases} \quad (7.15)$$

Damit können wir die mehrfachen Integrale der Reihe umschreiben:

$$\int_0^t dt_1 \mathcal{Q}\mathcal{L}\mathcal{Q}(t_1) \int_0^{t_1} dt_2 \mathcal{Q}\mathcal{L}\mathcal{Q}(t_2) = \int_0^t dt_2 \int_{t_2}^t dt_1 T(\mathcal{Q}\mathcal{L}\mathcal{Q}(t_1) \mathcal{Q}\mathcal{L}\mathcal{Q}(t_2)) \quad (7.16)$$

$T(\mathcal{Q}\mathcal{L}\mathcal{Q}(t_1) \mathcal{Q}\mathcal{L}\mathcal{Q}(t_2))$ hat auch die richtige Ordnung der Operatoren (der spätere steht links vom früheren), wenn $t_1 < t_2$ ist. Betrachte deshalb das Integral mit modifizierten Grenzen für t_2 :

$$\begin{aligned} \Rightarrow \int_0^t dt_1 \int_0^{t_1} dt_2 T(\mathcal{Q}\mathcal{L}\mathcal{Q}(t_1) \mathcal{Q}\mathcal{L}\mathcal{Q}(t_2)) \\ = \int_0^t dt_1 \int_0^{t_1} dt_2 \mathcal{Q}\mathcal{L}\mathcal{Q}(t_1) \mathcal{Q}\mathcal{L}\mathcal{Q}(t_2) + \int_0^t dt_1 \int_{t_1}^t dt_2 \mathcal{Q}\mathcal{L}\mathcal{Q}(t_2) \mathcal{Q}\mathcal{L}\mathcal{Q}(t_1) \end{aligned} \quad (7.17)$$

Der erste Term auf der rechten Seite von Gleichung (7.17) kommt in der Reihe (Gleichung (7.14)) vor. Für den zweiten Term auf der rechten Seite von Gleichung (7.17) läßt sich schreiben:

$$\int_0^t dt_1 \int_{t_1}^t dt_2 \mathcal{Q}\mathcal{L}\mathcal{Q}(t_2) \mathcal{Q}\mathcal{L}\mathcal{Q}(t_1) = \int_0^t dt_2 \int_0^{t_2} dt_1 \mathcal{Q}\mathcal{L}\mathcal{Q}(t_2) \mathcal{Q}\mathcal{L}\mathcal{Q}(t_1) \quad (7.18)$$

Mit $t'_1 = t_2$ und $t'_2 = t_1$ folgt:

$$\Rightarrow \text{2. Term in Gleichung (7.17)} = \int_0^t dt'_1 \int_0^{t'_1} dt'_2 \mathcal{Q}\mathcal{L}\mathcal{Q}(t'_1) \mathcal{Q}\mathcal{L}\mathcal{Q}(t'_2) \quad (7.19)$$

Gleichung (7.19) ist wieder ein Term, der in unserer Reihe (Gleichung (7.14)) vorkommt.

$$\begin{aligned} \Rightarrow \int_0^t dt_1 \int_0^{t_1} dt_2 \mathcal{Q}\mathcal{L}\mathcal{Q}(t_1) \mathcal{Q}\mathcal{L}\mathcal{Q}(t_2) \\ = \frac{1}{2!} \int_0^t dt_1 \int_0^{t_1} dt_2 T(\mathcal{Q}\mathcal{L}\mathcal{Q}(t_1) \mathcal{Q}\mathcal{L}\mathcal{Q}(t_2)) \end{aligned} \quad (7.20)$$

Wir haben es also erreicht, dass der erste Term der Reihe mit Hilfe von Integralen mit unabhängigen Grenzen geschrieben werden kann. Man kann zeigen, dass eine entsprechende allgemeine Relation gilt:

$$\begin{aligned} \int_0^t dt_1 \int_0^{t_1} dt_2 \dots \int_0^{t_{n-1}} dt_n \mathcal{Q}\mathcal{L}\mathcal{Q}(t_1) \dots \mathcal{Q}\mathcal{L}\mathcal{Q}(t_n) \\ = \frac{1}{n!} \int_0^t dt_1 \dots \int_0^{t_1} dt_n T(\mathcal{Q}\mathcal{L}\mathcal{Q}(t_1) \dots \mathcal{Q}\mathcal{L}\mathcal{Q}(t_n)) \end{aligned} \quad (7.21)$$

$$\begin{aligned} \Rightarrow \mathcal{Q}_\varrho(t) &= \left\{ 1 - \frac{i}{\hbar} \int_0^t dt_1 \mathcal{Q}\mathcal{L}\mathcal{Q} \dots \right. \\ &\quad \left. + \frac{1}{n!} \left(\frac{-i}{\hbar} \right)^n \int_0^t dt_1 \dots \int_0^{t_1} dt_n T(\mathcal{Q}\mathcal{L}\mathcal{Q}(t_1) \dots \mathcal{Q}\mathcal{L}\mathcal{Q}(t_n)) \right\} \mathcal{Q}_\varrho(0) \\ &= T \exp \left(\frac{-i}{\hbar} \int_0^t dt' \mathcal{Q}\mathcal{L}\mathcal{Q}(t') \right) \mathcal{Q}_\varrho(0) \end{aligned} \quad (7.22)$$

$$= : U_{\mathcal{Q}\mathcal{Q}}(t) \mathcal{Q}_\varrho(0) \quad (7.23)$$

Dies ist die Lösung der homogenen Gleichung

$$i\hbar \dot{\mathcal{Q}} = \mathcal{Q}\mathcal{L}\mathcal{Q}(\mathcal{Q}_\varrho) \quad (7.24)$$

Das zeitgeordnete Exponential $T \exp$ ist dabei definiert über seine Taylor-Reihe, in der Integrale über verschiedene Variablen t_1, t_2, \dots auftreten. Der Zeitordnungsoperator T sorgt dafür, dass die Zeiten genau entsprechend ihrem Auftreten in Reihe (7.14) erscheinen.

Herleitung der Master-Gleichung: Fortsetzung

Zur Herleitung der Master-Gleichung ist nun der Ansatz $\mathcal{Q}_\varrho(t) = U_{QQ}(t)\tilde{\varrho}_Q(t)$ zweckmäßig.

$$\Rightarrow i\hbar\partial_t\mathcal{Q}_\varrho = i\hbar\dot{U}_{QQ}\tilde{\varrho}_Q + i\hbar U_{QQ}\dot{\tilde{\varrho}}_Q \quad (7.25)$$

Mit $\dot{U}_{QQ} = -\frac{i}{\hbar}\mathcal{QLQ}(t)U_{QQ}(t)$ folgt unter Verwendung der Gleichung (7.10):

$$i\hbar\dot{\tilde{\varrho}}_Q = U_{QQ}^{-1}(t)\mathcal{QLP}_\varrho(t) \quad (7.26)$$

$$\Rightarrow \tilde{\varrho}_Q(t) = \tilde{\varrho}_Q(0) - \frac{i}{\hbar} \int_0^t dt' U_{QQ}^{-1}(t') \mathcal{QLP}_\varrho(t') \quad (7.27)$$

$$\Rightarrow \mathcal{Q}_\varrho(t) = \mathcal{Q}_\varrho(0) - \frac{i}{\hbar} U_{QQ}(t) \int_0^t dt' U_{QQ}^{-1}(t') \mathcal{QLQ}\mathcal{P}_\varrho(t') \quad (7.28)$$

Setze Gleichung (7.28) in die Gleichung für \mathcal{P}_ϱ ein:

$$\boxed{i\hbar\dot{\mathcal{P}}_\varrho = \mathcal{PLP}_\varrho + \mathcal{PL}(t)\mathcal{Q} \left\{ \mathcal{Q}_\varrho(0) - \frac{i}{\hbar} U_{QQ}(t) \int_0^t dt' U_{QQ}^{-1}(t') \mathcal{QLP}_\varrho(t') \right\}} \quad (7.29)$$

Gleichung (7.29) ist *Zwanzigs Master-Gleichung*.

Dies ist eine exakte Differentialgleichung für \mathcal{P}_ϱ alleine, die in der Praxis ohne Näherungen nicht gelöst werden kann. Um sie zu vereinfachen, spezialisieren wir uns nun auf einen Super-Projektor von der Form 7.9 und betrachten folgenden Spezialfall:

1. $\varrho(0) = \varrho_R(0) \otimes \varrho_S(0)$, d.h. keine Korrelationen zwischen System und Reservoir zur Zeit $t = 0$
2. $[\varrho_R(0), H_R] = 0$, d.h. das Reservoir ist in einem stationären Zustand von H_R (es gilt $H = H_R + H_S + H_{\text{int}}$).
3. $\text{Tr}_R(\varrho_R(0)H_{\text{int}}) = 0$ z.B. $H_{\text{int}} = -\mathbf{d} \cdot \mathbf{E}$, das Reservoir entspricht der Strahlung
 $\Rightarrow \text{Tr}_R(\varrho_R(0)H_{\text{int}}) = -\mathbf{d} \langle \mathbf{E} \rangle (t = 0) = 0$.²

Unter diesen Voraussetzungen gilt

$$\begin{aligned} \mathcal{Q}_\varrho(0) &= \varrho(0) - \mathcal{P}_\varrho(0) \\ &= \varrho_R(0) \otimes \varrho_S(0) - \varrho_R(0) \otimes \text{Tr}_R(\varrho_R(0) \otimes \varrho_S(0)) \\ &= \varrho_R(0) \otimes \varrho_S(0) - \varrho_R(0) \otimes \varrho_S(0) \\ &= 0 \end{aligned} \quad (7.30)$$

²In einem stationären Zustand ist im freien Raum $\langle \mathbf{E} \rangle = 0$, da ein solcher Zustand einem Gemisch (keiner Superposition) von Teilchenzahl-Zuständen entspricht. Wegen $\mathbf{E} \sim a + a^\dagger$ gilt daher $\langle n | a + a^\dagger | n \rangle = \langle n | (\sqrt{n} | n-1 \rangle + \sqrt{n+1} | n+1 \rangle) = 0$

Aus den Übungen sind für einen beliebigen Operator X die folgenden Relationen bekannt:

$$\mathcal{P}\mathcal{L}\mathcal{P}X = \varrho_R(0)[H_S, \text{Tr}_R(X)] = \mathcal{P}\mathcal{L}_S X \quad (7.31)$$

$$\mathcal{P}\mathcal{L}\mathcal{Q}X = \varrho_R(0)\text{Tr}_R([H_{int}, X]) = \mathcal{P}\mathcal{L}_{int}X \quad (7.32)$$

$$\mathcal{Q}\mathcal{L}\mathcal{P}X = [H_{int}, \varrho_R(0)\text{Tr}_R(X)] = \mathcal{L}_{int}\mathcal{P}X \quad (7.33)$$

Desweiteren findet man

$$\begin{aligned} \mathcal{Q}\mathcal{L}\mathcal{Q}X &= (1 - \mathcal{P})\mathcal{L}\mathcal{Q}X \\ &= \mathcal{L}\mathcal{Q}X - \mathcal{P}\mathcal{L}\mathcal{Q}X \\ &= \mathcal{L}(1 - \mathcal{P})X - \mathcal{P}\mathcal{L}_{int}X \\ &= \mathcal{L}X - \mathcal{L}\mathcal{P}X - \mathcal{P}\mathcal{L}_{int}X \\ &= [H_S + H_R + H_{int}, X] - [H_S + H_R + H_{int}, \varrho_R(0)\text{Tr}_R(X)] \\ &\quad - \varrho_R(0)\text{Tr}_R([H_{int}, X]) \\ &= [H_S + H_R + H_{int}, X] - [H_S, \varrho_R(0)\text{Tr}_R(X)] \\ &\quad - [H_R, \varrho_R(0)]\text{Tr}_R(X) - [H_{int}, \varrho_R(0)\text{Tr}_R(X)] \\ &\quad - \varrho_R(0)\text{Tr}_R([H_{int}, X]) \end{aligned}$$

Mit $[H_R, \varrho_R(0)] = 0$ folgt daraus:

$$\begin{aligned} \mathcal{Q}\mathcal{L}\mathcal{Q}X &= [H_S, X - \mathcal{P}X] + [H_R, X] + [H_{int}, X - \mathcal{P}X] - \mathcal{P}[H_{int}, X] \\ &= [H_S, \mathcal{Q}X] + \mathcal{L}_R X + [H_{int}, \mathcal{Q}X] - \mathcal{P}\mathcal{L}_{int}X \\ &= (\mathcal{L}_S \mathcal{Q} + \mathcal{L}_R + \mathcal{L}_{int} \mathcal{Q} - \mathcal{P}\mathcal{L}_{int})X \end{aligned} \quad (7.34)$$

Weitere Eigenschaften:

$$\mathcal{L}_S \mathcal{Q} = \mathcal{Q}\mathcal{L}_S \quad (7.35)$$

$$\mathcal{P}\mathcal{L}_S = \mathcal{L}_S \mathcal{P} \quad (7.36)$$

Einsetzen in die Master-Gleichung (Gleichung (7.29)) liefert:

$$i\hbar\mathcal{P}\dot{\varrho} = \mathcal{P}\mathcal{L}_S\mathcal{P}\varrho - \frac{i}{\hbar}\mathcal{P}\mathcal{L}_{int} \int_0^t dt' U_{\mathcal{Q}\mathcal{Q}}(t) U_{\mathcal{Q}\mathcal{Q}}^{-1}(t') \mathcal{L}_{int} \mathcal{P}\varrho(t')$$

$$U_{\mathcal{Q}\mathcal{Q}}(t) = T \exp \left(\frac{-i}{\hbar} \int_0^t dt'' \mathcal{Q}\mathcal{L}(t'') \mathcal{Q} \right)$$

$$\mathcal{L}(t)X = [H(t), X] = [H_S + H_R + H_{int}, X]$$

Näherung: Berücksichtige H_{int} nur bis zur 2. Ordnung. (Annahme: $H_{int} \ll H_R, H_S$)

$$\Rightarrow U_{\mathcal{Q}\mathcal{Q}} \approx \exp \left(-\frac{i}{\hbar} \mathcal{Q}(\mathcal{L}_S + \mathcal{L}_R)\mathcal{Q}t \right)$$

Falls H_S und H_R zeitunabhängig sind.

$$\begin{aligned}\mathcal{Q}\mathcal{L}_s &= \mathcal{L}_s\mathcal{Q} & \Rightarrow \mathcal{Q}\mathcal{L}_s\mathcal{Q} &= \mathcal{L}_s\mathcal{Q} = \mathcal{Q}\mathcal{L}_s \\ \mathcal{Q}\mathcal{L}_R &= \mathcal{L}_R\mathcal{Q} = \mathcal{L}_R & & \\ & \Rightarrow U_{\mathcal{Q}\mathcal{Q}} = e^{-i\mathcal{Q}\mathcal{L}_st/\hbar}e^{-i\mathcal{L}_Rt/\hbar}\end{aligned}$$

Im letzten Schritt haben wir dabei $\mathcal{L}_s\mathcal{L}_R = \mathcal{L}_R\mathcal{L}_s$ verwendet, was in der folgenden Weise bewiesen werden kann:

$$\begin{aligned}(\mathcal{L}_R\mathcal{L}_s - \mathcal{L}_s\mathcal{L}_R)X &= [H_R, [H_S, X]] - [H_S, [H_R, X]] \\ &= [H_R, [H_S, X]] + [H_S, [X, H_R]] \\ &= -[X, \underbrace{[H_R, H_S]}_{=0}] = 0\end{aligned}$$

wobei die Jakobi-Identität verwendet wurde. Es folgt

$$\begin{aligned}e^{-i\mathcal{Q}\mathcal{L}_st/\hbar} &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-it/\hbar)^n}{n!} (\mathcal{Q}\mathcal{L}_s)^n \quad (\mathcal{Q}\mathcal{L}_s)^n = \mathcal{L}_s^n \mathcal{Q}^n = \mathcal{L}_s^n \mathcal{Q} \quad n > 0 \\ &\Rightarrow e^{-i\mathcal{Q}\mathcal{L}_st/\hbar} \mathcal{Q}\mathcal{L}\mathcal{P} = e^{-i\mathcal{L}_st/\hbar} \mathcal{Q}\mathcal{L}\mathcal{P}\end{aligned}$$

Damit erhält man für die Master-Gleichung:

$$i\hbar\mathcal{P}\dot{\varrho} = \mathcal{P}\mathcal{L}_S\mathcal{P}\varrho - \frac{i}{\hbar}\mathcal{P}\mathcal{L}_{int} \underbrace{\int_0^t dt' \exp\left\{\frac{-i}{\hbar}(t-t')(\mathcal{L}_s + \mathcal{L}_R)\right\} \mathcal{L}_{int}\mathcal{P}\varrho(t')}_{\text{freie Zeitentwicklung}}$$

$$\mathcal{P}\varrho = \varrho_R(0)\text{Tr}_R(\varrho) = \varrho_R(0)\varrho_s(t)$$

$$\begin{aligned}\Rightarrow i\hbar\varrho_R(0)\dot{\varrho}_s &= \varrho_R(0) \underbrace{\text{Tr}_R([H_S, \varrho_R(0)\varrho_s])}_{[H_S, \varrho_s]} - \\ &\quad - \frac{i}{\hbar}\varrho_R(0)\text{Tr}_R\left([H_{int}, \int_0^t dt' e^{-i(t-t')(\mathcal{L}_s+\mathcal{L}_R)/\hbar} [H_{int}, \varrho_R(0)\varrho_s(t')]]\right)\end{aligned}$$

$$\boxed{i\hbar\dot{\varrho}_s(t) = [H_S, \varrho_s(t)] - \frac{i}{\hbar} \int_0^t dt' \text{Tr}_R\left([H_{int}, e^{-i(t-t')(\mathcal{L}_s+\mathcal{L}_R)/\hbar} [H_{int}, \varrho_R(0)\varrho_s(t')]]\right)}$$

Dies ist die allgemeine Master-Gleichung unter der Bedingung $H_{int} \ll H_R, H_S$ und $\dot{H}_s = \dot{H}_R = 0$.

Annahme über die Form der Wechselwirkung: $H_{int} = -d_i E_i$, $i = 1, \dots, N$ wobei d_i Operatoren auf \mathcal{H}_s und E_i Operatoren auf \mathcal{H}_R sind.

$$\Rightarrow \text{Tr}_R ([H_{int}, \dots]) = \text{Tr}_R \left([d_i E_i, e^{-i(t-t')(\mathcal{L}_s + \mathcal{L}_R)/\hbar} [d_l E_l, \varrho_R(0) \varrho_s(t')]] \right)$$

mit $e^{-i\mathcal{L}t/\hbar} X = e^{-iHt/\hbar} X e^{iHt/\hbar}$ (siehe Anfang des Kapitels)

$$\Rightarrow e^{-i(t-t')(\mathcal{L}_s + \mathcal{L}_R)/\hbar} [d_l E_l, \varrho_R(0) \varrho_s(t')] = [d_l(t-t') E_l(t-t'), \varrho_R(0) e^{-iH_S(t-t')/\hbar} \varrho_s(t') e^{iH_S(t-t')/\hbar}]$$

mit

$$\begin{aligned} \hat{d}_l(t-t') &= e^{-i(t-t')H_S/\hbar} \hat{d}_l e^{i(t-t')H_S/\hbar} \\ \hat{E}_l(t-t') &= e^{-i(t-t')H_R/\hbar} \hat{E}_l e^{i(t-t')H_R/\hbar} \\ \varrho_R(t) &= \varrho_R(0) \quad \text{wegen } [H_R, \varrho_R(0)] = 0 \end{aligned}$$

Bemerkung: $\hat{d}_l(-t)$ ist der Operator \hat{d}_l im Wechselwirkungsbild

$$\text{Tr}_R ([H_{int}, \dots]) = \text{Tr}_R \left([d_i E_i, [d_l(t-t') E_l(t-t'), \varrho_R(0) \underbrace{U_s(t-t') \varrho_s(t') U_s^\dagger(t-t')}_{=:\bar{\varrho}_s}]] \right)$$

mit $U_s(t) := e^{-iH_S t/\hbar}$

$$\begin{aligned} \Rightarrow \text{Tr}_R (\dots) &= \text{Tr}_R \left(d_i E_i d_l(t-t') E_l(t-t') \varrho_R(0) \bar{\varrho}_s - d_i E_i \varrho_R(0) \bar{\varrho}_s d_l(t-t') E_l(t-t') - \right. \\ &\quad \left. - d_l(t-t') E_l(t-t') \varrho_R(0) \bar{\varrho}_s d_i E_i + \varrho_R(0) \bar{\varrho}_s d_l(t-t') E_l(t-t') d_i E_i \right) \\ &= d_i d_l(t-t') \bar{\varrho}_s \text{Tr}_R (E_i E_l(t-t') \varrho_R(0)) - d_i \bar{\varrho}_s d_l(t-t') \text{Tr}_R (E_i \varrho_R(0) E_l(t-t')) - \\ &\quad - d_l(t-t') \bar{\varrho}_s d_i \text{Tr}_R (E_l(t-t') \varrho_R(0) E_i) + \bar{\varrho}_s d_l(t-t') d_i \text{Tr}_R (\varrho_R(0) E_l(t-t') E_i) \end{aligned}$$

Setze $F_{m_1 m_2}(t_1, t_2) := \text{Tr}_R (E_{m_1}(t_1) E_{m_2}(t_2) \varrho_R(0)) = \langle E_{m_1}(t_1) E_{m_2}(t_2) \rangle$

$$\begin{aligned} \Rightarrow \text{Tr}_R (\dots) &= d_i d_l(t-t') \bar{\varrho}_s F_{il}(0, t-t') - d_i \bar{\varrho}_s d_l(t-t') F_{li}(t-t', 0) - \\ &\quad - d_l(t-t') \bar{\varrho}_s d_i F_{il}(0, t-t') + \bar{\varrho}_s d_l(t-t') d_i F_{li}(t-t', 0) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \Rightarrow i\hbar \partial_t \varrho_s(t) &= [H_S, \varrho_s(t)] - \frac{i}{\hbar} \int_0^t dt' \left(F_{il}(0, t-t') [d_i, d_l(t-t') \bar{\varrho}_s] + \right. \\ &\quad \left. F_{li}(t-t', 0) [\bar{\varrho}_s d_l(t-t'), d_i] \right) \end{aligned}$$

Wir führen nun die sehr verbreitete *Markov-Näherung* durch. Idee: Die Reservoir-Funktion $F_{il}(0, t-t')$ fällt oft sehr schnell mit $t-t'$ ab. (Das Reservoir "vergisst" sehr schnell, wie sein Zustand war). Für kleine $t-t'$ kann $\varrho_s(t')$ dann angenähert werden durch:

$$\varrho_s(t') \approx U_s(t'-t) \varrho_s(t) U_s^\dagger(t'-t)$$

U_s beschreibt die freie Zeitentwicklung. Man nimmt also an, dass sich das System für kurze Zeiten im wesentlichen frei entwickelt.

$$\Rightarrow \bar{\varrho}_s = U_s(t - t') \varrho_s(t') U_s^\dagger(t - t') = \varrho_s(t)$$

$$i\hbar \partial_t \varrho_s(t) = [H_S, \varrho_s(t)] - \frac{i}{\hbar} \int_0^t dt' \left(F_{il}(0, t - t') [d_i, d_l(t - t') \varrho_s(t)] + F_{li}(t - t', 0) [d_l(t - t') \varrho_s(t), d_i] \right)$$

Setze $\tau = t - t'$ $d\tau = -dt'$

$$\Rightarrow i\hbar \partial_t \varrho_s(t) = [H_S, \varrho_s(t)] - \frac{i}{\hbar} \int_0^t d\tau \left(F_{il}(0, \tau) [d_i, d_l(\tau) \varrho_s(t)] + F_{li}(\tau, 0) [\varrho_s(t) d_l(\tau), d_i] \right)$$

Da $F_{il}(0, \tau)$ schnell abfällt, kann man die Integrationsgrenze t durch ∞ ersetzen.

\Rightarrow Endgültige Form der Master-Gleichung in der Markov-Näherung:

$$i\hbar \partial_t \varrho_s(t) = [H_S, \varrho_s(t)] - \frac{i}{\hbar} \int_0^\infty d\tau \left(F_{il}(0, \tau) [d_i, d_l(\tau) \varrho_s(t)] + F_{li}(\tau, 0) [\varrho_s(t) d_l(\tau), d_i] \right)$$

Die *Master-Gleichung in Markov-Näherung*

- ist eine lineare Differentialgleichung und im Gegensatz zur allgemeinen Master-Gleichung keine Integro-Differentialgleichung mehr,
- hat konstante Koeffizienten (gegeben durch das Integral über τ).

7.4 Spontane Emission

Bei der spontanen Emission im freien Raum spielt das Atom die Rolle des Systems, an dem wir interessiert sind. Die Strahlung bildet das Reservoir, dessen Zustand im wesentlichen konstant ist, da im freien Raum spontan emittierte Photonen nicht zum Atom zurückkehren.

$$H_S = \sum_n E_n |n\rangle \langle n|, |n\rangle = \text{atomare Energieniveaus}$$

$$H_R = \int d^3k \sum_\sigma \hbar \omega_k a_{k,\sigma}^\dagger a_{k,\sigma}$$

$$H_{int} = -\mathbf{d} \cdot \mathbf{E}(\mathbf{x}) = -\mathbf{d}^{(+)} \mathbf{E}^{(+)} - \mathbf{d}^{(-)} \mathbf{E}^{(-)}$$

wobei \mathbf{x} der Ort des Atoms ist und in der letzten Gleichung die rotating wave approximation gemacht wurde.

$\mathbf{E}^{(+)} = \text{positiver Frequenzanteil } (\propto a_{k,\sigma})$

$\mathbf{d}^{(+)} = \text{Aufsteigeoperator}$

- Beim 2-Niveau-System: $\mathbf{d}^{(+)} = \mathbf{d}_{eg} |e\rangle \langle g|$
- Bei zwei Multipletts: $\mathbf{d}^{(+)} = \sum_{m_e, m_g} |J_e, m_e\rangle \langle J_g, m_g| \mathbf{d}_{m_e, m_g}$

Der anfängliche Zustand der Strahlung soll das Vakuum sein: $\varrho_R(0) = |0\rangle \langle 0|$. Die Master-Gleichung lautet allgemein in der Markov-Näherung

$$i\hbar \dot{\varrho}_S = [H_S, \varrho_S] - \frac{i}{\hbar} \int_0^\infty d\tau \left\{ [d_i, d_j(\tau) \varrho_S] \langle E_i E_j(\tau) \rangle + [\varrho_S d_j(\tau), d_i] \langle E_j(\tau) E_i \rangle \right\} \quad (7.37)$$

In unserem Fall setzen wir ³

$$\begin{aligned} \mathbf{d}_1 &= \mathbf{d}^{(+)} ; \mathbf{E}_1 = \mathbf{E}^{(+)} \\ \mathbf{d}_2 &= \mathbf{d}^{(-)} ; \mathbf{E}_2 = \mathbf{E}^{(-)} \end{aligned}$$

Man kann leicht nachrechnen, dass wegen des Vakuumzustandes der Strahlung

$$\langle 0 | E_a^{(+)} E_b^{(+)} | 0 \rangle = \langle 0 | E_a^{(-)} E_b^{(-)} | 0 \rangle = \langle 0 | E_a^{(-)} E_b^{(+)} | 0 \rangle = 0$$

gilt. Für die Master-Gleichung folgt damit

$$\begin{aligned} \left\{ [d_i, \dots] \langle \dots \rangle \dots \right\} &= \left\{ \langle E_a^{(+)} E_b^{(-)}(\tau) \rangle [d_a^{(+)}, d_b^{(-)}(\tau) \varrho_S] \right. \\ &\quad \left. + \langle E_b^{(+)}(\tau) E_a^{(-)} \rangle [\varrho_S d_b^{(+)}(\tau), d_a^{(-)}] \right\} \end{aligned}$$

Die Korrelationsfunktion hat den folgenden Wert (siehe Übungen):

$$\langle 0 | E_a^{(+)}(\mathbf{x}, 0) E_b^{(-)}(\mathbf{x}, \tau) | 0 \rangle = \frac{\hbar}{6\pi^2 \epsilon_0 c^3} \delta_{ab} \int_0^\infty d\omega_k \omega_k^3 e^{-i\omega_k \tau} \quad (7.38)$$

Die zweite Korrelationsfunktion, bei der τ im ersten Operator vorkommt, kann man mittels des freien Zeitentwicklungsoperators $U(\tau)$ mit diesem Ergebnis verbinden:

$$\langle 0 | E_a^{(+)}(\tau) E_b^{(-)}(0) | 0 \rangle = \langle 0 | U(\tau) E_a^{(+)}(0) U^\dagger(\tau) E_b^{(-)}(0) | 0 \rangle$$

Verwende $U |0\rangle = |0\rangle$:

$$\begin{aligned} \Rightarrow \langle 0 | E_a^{(+)}(\tau) E_b^{(-)}(0) | 0 \rangle &= \langle 0 | E_a^{(+)}(0) U^\dagger(\tau) E_b^{(-)}(0) U(\tau) | 0 \rangle \\ &= \langle 0 | E_a^{(+)}(0) E_b^{(-)}(-\tau) | 0 \rangle \end{aligned}$$

Die Zeitabhängigkeit der atomaren Operatoren ist bei freier Zeitentwicklung gegeben durch

$$\mathbf{d}^{(+)}(\tau) = \sum_{m_e, m_g} |J_e m_e\rangle \langle J_g m_g| \mathbf{d}_{m_e, m_g} e^{i\tau(E_{m_g} - E_{m_e})/\hbar}$$

³Genau genommen steht in der allgemeinen Summe oben jedes d_i für eine Vektor-Komponente von entweder $\mathbf{d}^{(+)}$ oder $\mathbf{d}^{(-)}$. Um die Notation übersichtlich zu halten, unterdrücken wir aber diesen Punkt.

$$\begin{aligned} \Rightarrow & \int_0^\infty d\tau d_a^{(+)}(\tau) \langle E_a^{(+)}(\tau) E_b^{(-)}(0) \rangle \\ &= \frac{\hbar}{6\pi^2 \epsilon_0 c^3} \sum_{m_e, m_g} (\mathbf{d}_{m_e, m_g})_b |J_e, m_e\rangle \langle J_g, m_g| \int_0^\infty \omega^3 d\omega \int_0^\infty d\tau e^{i\tau(\omega - \omega_{m_e, m_g})} \end{aligned}$$

mit $\omega_{m_e, m_g} := (E_{m_e} - E_{m_g})/\hbar$. Unter Verwendung $\int_0^\infty d\tau e^{-i\omega\tau} = \pi\delta(\omega) - i\mathcal{P}/\omega$ folgt daraus

$$\begin{aligned} \int_0^\infty d\tau d_a^{(+)}(\tau) \langle E_a^{(+)}(\tau) E_b^{(-)}(0) \rangle &= \frac{\hbar}{6\pi^2 \epsilon_0 c^3} \sum_{m_e, m_g} |J_e, m_e\rangle \langle J_g, m_g| (\mathbf{d}_{m_e, m_g})_b \\ &\quad \times \left(\pi\omega_{m_e, m_g}^3 + i \int_0^\infty d\omega \frac{\mathcal{P}\omega^3}{(\omega - \omega_{m_e, m_g})} \right) \\ &=: \sum_{m_e, m_g} |J_e, m_e\rangle \langle J_g, m_g| (\mathbf{d}_{m_e, m_g})_b (K_{m_e m_g} + iK'_{m_e m_g}) \\ &=: \hat{\mathbf{K}}_b^{(+)} + i\hat{\mathbf{K}}_b'^{(+)} \end{aligned}$$

Die Operatoren $\hat{\mathbf{K}}^{(+)}$ und $\hat{\mathbf{K}}'^{(+)}$ wirken dabei nur noch auf die atomaren Freiheitsgrade und sind zeitunabhängig. Als Ergebnis erhalten wir die Master-Gleichung für atomare Multipletts

$$\boxed{i\hbar\dot{\varrho}_S = [H_S, \varrho_S] - \frac{i}{\hbar} \left\{ [d_a^{(+)}, (\hat{K}_a^{(-)} - i\hat{K}_a'^{(-)})\varrho_S] + [\varrho_S(\hat{K}_a^{(+)} + i\hat{K}_a'^{(+)}), d_a^{(-)}] \right\}} \quad (7.39)$$

wobei wir $\hat{\mathbf{K}}^{(-)} := (\hat{\mathbf{K}}^{(+)})^\dagger$ und $\hat{\mathbf{K}}'^{(-)} := (\hat{\mathbf{K}}'^{(+)})^\dagger$ eingeführt haben.

Wenden wir dieses Ergebnis auf das Zwei-Niveau-System an, so haben diese Operatoren die einfache Gestalt

$$\hat{\mathbf{K}}^{(+)} = |e\rangle\langle g| \mathbf{d}_{eg} \frac{\hbar\omega_0^3}{6\pi\epsilon_0 c^3}; \quad \hat{\mathbf{K}}'^{(+)} = |e\rangle\langle g| \mathbf{d}_{eg} \int_0^\infty \dots \quad (7.40)$$

Der Zahlenwert des Integrals in $\hat{\mathbf{K}}'^{(+)}$ ist dabei irrelevant, da er nicht nur divergiert (und renormiert werden muß) sondern im Rahmen des Zwei-Niveau-Modells und der rotating wave approximation auch nach der Renormierung inkorrekt ist. Setzen wir diese Operatoren in Gl. (7.39) ein, so erhalten wir die *Master-Gleichung für Zwei-Niveau-Atome*

$$\begin{aligned} \dot{\varrho} &= -\frac{i}{\hbar} [\hbar\omega_0 |e\rangle\langle e|, \varrho] - \frac{i}{\hbar} [\hbar\Delta_{\text{Lamb}} |e\rangle\langle e|, \varrho] \\ &\quad - \frac{\gamma}{2} (\sigma_+ \sigma_- \varrho + \varrho \sigma_+ \sigma_- - 2\sigma_- \varrho \sigma_+) \end{aligned} \quad (7.41)$$

mit

$$\gamma := \frac{|\mathbf{d}_{eg}|^2 \omega_0^3}{3\pi\hbar\epsilon_0 c^3} \quad (7.42)$$

und

$$\Delta_{\text{Lamb}} := -\frac{|\mathbf{d}_{eg}|^2}{6\pi^2\hbar\epsilon_0 c^3} \int_0^\infty d\omega \frac{\mathcal{P}\omega^3}{(\omega - \omega_0)}$$

Konsequenzen Realteil $\mathbf{K}^{(+)}$ und Imaginärteil $\mathbf{K}'^{(+)}$ haben offensichtlich völlig unterschiedliche Konsequenzen.

- $\hat{\mathbf{K}}'^{(+)}$ enthält das Hauptwert-Integral über ω und ist daher mit dem Kommutator $\propto \Delta_L$ verbunden. Es bewirkt eine Verschiebung der Resonanzfrequenz: $\omega'_0 = \omega_0 + \Delta_L$. Die Verschiebung Δ_L heißt *Lamb-Shift*.
- Δ_L ist divergent und müsste renormiert werden. Eine Behandlung, die über das 2-Niveau-Modell hinausgeht, findet man in Ref. [7]. Δ_L verändert nicht die Unitarität der Zeitentwicklung.
- Der Realteil $\hat{\mathbf{K}}^{(+)}$ ist die Ursache für den Term proportional zu γ und beschreibt eine nicht unitäre Zeitentwicklung (s.u.);
 γ ist die *spontane Emissionsrate*.
- Die Struktur $-\frac{\gamma}{2}(R^\dagger R \varrho + \varrho R^\dagger R - 2R \varrho R^\dagger)$ ist die allgemeinste Form eines Terms zur Beschreibung inkohärenter Prozesse und wird Lindblad-Form genannt. R ist dabei ein verallgemeinerter Auf- oder Absteigeoperator.
Beispiel: Strahlung bei Temperatur T statt $|0\rangle \Rightarrow$ Thermische Anregung der Atome:

$$-\eta(T)(\sigma_- \sigma_+ \varrho + \varrho \sigma_- \sigma_+ - 2\sigma_+ \varrho \sigma_-)$$

Mehr dazu kann man z.B. in Ref. [5] finden.

Im Folgenden wird die Lamb-Shift in die Laserfrequenz integriert: $\omega \equiv \omega_0 + \Delta_L$.

$$\dot{\varrho} = -\frac{i}{\hbar}[\hbar\omega |e\rangle\langle e|, \varrho] - \frac{\gamma}{2}\{\sigma_+ \sigma_- \varrho + \varrho \sigma_+ \sigma_- - 2\sigma_- \varrho \sigma_+\} \quad (7.43)$$

Damit läßt sich die Zeitentwicklung von ϱ einfach berechnen:

$$\varrho = \begin{pmatrix} \varrho_{ee} & \varrho_{eg} \\ \varrho_{ge} & \varrho_{gg} \end{pmatrix}$$

Zunächst wird der Kommutator mit dem Systemhamiltonian berechnet:

$$[|e\rangle\langle e|, \varrho] = \left[\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \varrho \right] = \begin{pmatrix} 0 & \varrho_{eg} \\ -\varrho_{ge} & 0 \end{pmatrix}$$

Für die Lindblad-Form gilt:

$$\sigma_+ \sigma_- = |e\rangle\langle g|g\rangle\langle e| = |e\rangle\langle e|$$

und damit

$$|e\rangle\langle e| \varrho + \varrho |e\rangle\langle e| - 2 \underbrace{|g\rangle\langle e|}_{\sigma_-} \varrho \underbrace{|e\rangle\langle g|}_{\sigma_+} = \begin{pmatrix} 2\varrho_{ee} & \varrho_{eg} \\ \varrho_{ge} & -2\varrho_{ee} \end{pmatrix}$$

Damit lautet die komplette Master-Gleichung:

$$\begin{pmatrix} \dot{\varrho}_{ee} & \dot{\varrho}_{eg} \\ \dot{\varrho}_{ge} & \dot{\varrho}_{gg} \end{pmatrix} = -i\omega \begin{pmatrix} 0 & \varrho_{eg} \\ -\varrho_{ge} & 0 \end{pmatrix} - \frac{\gamma}{2} \begin{pmatrix} 2\varrho_{ee} & \varrho_{eg} \\ \varrho_{ge} & -2\varrho_{ee} \end{pmatrix} \quad (7.44)$$

Für die linear unabhängigen Komponenten gilt:

$$\begin{aligned} \dot{\varrho}_{ee} &= -\gamma\varrho_{ee} & \Rightarrow & \varrho_{ee}(t) = \varrho_{ee}(0)e^{-\gamma t} \\ \dot{\varrho}_{eg} &= \left(-i\omega - \frac{\gamma}{2}\right)\varrho_{eg} & \Rightarrow & \varrho_{eg}(t) = e^{-i\omega t}e^{-\frac{\gamma}{2}t}\varrho_{eg}(0) \\ \dot{\varrho}_{gg} &= \gamma\varrho_{ee} & \Rightarrow & \varrho_{gg}(t) = \varrho_{gg}(0) + (1 - e^{-\gamma t})\varrho_{ee}(0) \end{aligned} \quad (7.45)$$

Diese Lösung charakterisiert die spontane Emission:

- Der angeregte Zustand wird inkohärent entvölkert, da bei dem Übergang von e nach g keine Kohärenzen ϱ_{eg} , ϱ_{ge} entstehen. Bei Rabi-Oszillationen würden auch ϱ_{eg} , ϱ_{ge} zunächst wachsen.
- Anfänglich vorhandene Kohärenzen ϱ_{eg} , ϱ_{ge} zerfallen mit $\frac{\gamma}{2}$. Dies liegt daran, daß $|g\rangle\langle e|$ eine angeregte Komponente enthält, die zerfallen kann, $|e\rangle\langle e|$ dagegen zwei.
- Was oben an Population verloren geht, wird in ϱ_{gg} wieder aufgesammelt, das sichert die Wahrscheinlichkeitserhaltung.

$$\text{Tr } \varrho = 1 \quad \rightarrow \quad \text{Tr } \dot{\varrho} = 0 = \dot{\varrho}_{ee} + \dot{\varrho}_{gg}$$

Dies gilt allgemein für die Lindblad-Form:

$$\begin{aligned} \text{Tr } \dot{\varrho} &= -\frac{\gamma}{2} \text{Tr} \{R^\dagger R \varrho + \varrho R^\dagger R - 2R \varrho R^\dagger\} \\ &= -\frac{\gamma}{2} \text{Tr} \{R^\dagger R \varrho + R^\dagger R \varrho - 2R^\dagger R \varrho\} = 0 \end{aligned}$$

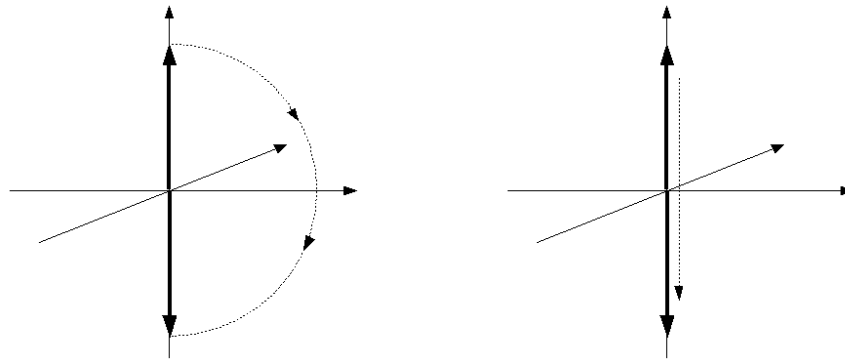
- Im Vergleich zur Master-Gleichung für die Dichtematrix kann die phänomenologische Beschreibung der spontanen Emission verschiedene Aspekte nicht korrekt beschreiben. Mit $\psi_e(t) = e^{-\frac{\gamma}{2}t}\psi_e(0)$ folgt für die Spur von ϱ :

$$|\psi_e|^2 + |\psi_g|^2 = e^{-\gamma t}|\psi_e(0)|^2 + |\psi_g(0)|^2 \neq \text{const.}$$

Es gilt keine Wahrscheinlichkeitserhaltung. Versucht man, dies zu reparieren, führt das zum zwischenzeitlichen Auftreten von Kohärenzen, die es bei einem spontanen Prozeß nicht geben sollte.

$$\psi_g(t) \propto \sqrt{|\psi_g(0)|^2 + (1 - e^{-\gamma t})|\psi_e(0)|^2} \Rightarrow \varrho_{eg} = \psi_e \psi_g^* \neq 0$$

ϱ_{eg} ist für $t = 0$ und $t \rightarrow \infty$ gleich 0, dazwischen aber nicht.

Abbildung 7.1: π -Puls (links) und spontane Emission (rechts) auf der Bloch-Kugel

Veranschaulichung auf der Bloch-Kugel:

Sowohl bei einer Rabi-Oszillation um den Winkel π als auch bei der spontanen Emission handelt es sich um die gleichen Ausgangs- und Endzustände. Am Beispiel der Bloch-Kugel wird der Unterschied deutlich: Bei der Rabi-Oszillation beschreibt der Bloch-Vektor einen Halbkreis und ändert seine Länge nicht: Das System befindet sich immer in einem reinen Zustand. Bei der spontanen Emission „schrumpft“ der Bloch-Vektor und entwickelt sich durch den Koordinatensprung nach unten, zwischenzeitlich entsteht dabei ein maximal unbestimmtes Gemisch.

Was geschieht, wenn man als Ausgangszustand eine beliebige Superposition zulässt? Ohne spon-

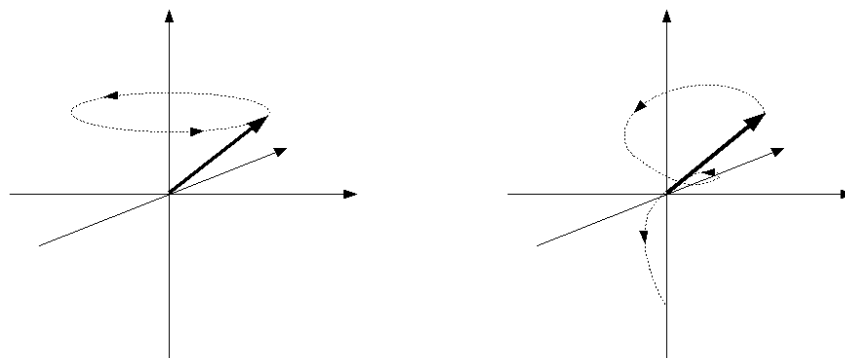


Abbildung 7.2: Verhalten einer beliebigen Superposition auf der Bloch-Kugel bei einer Rabi-Oszillation (links) und unter spontaner Emission (rechts).

tane Emission wird sich nur die Phase der Superposition entwickeln, der Bloch-Vektor behält seine Länge und bewegt sich auf einem Kreis mit konstantem Winkel zur z -Achse (Abbildung 7.2, links). Berücksichtigt man die spontane Emission, dann bewegt sich der Vektor auf einer Spiralbahn abwärts, wobei er zwischendurch kürzer wird und schließlich im Grundzustand landet (Abbildung 7.2, rechts). Zur Veranschaulichung des Übergangs vom reinen Zustand zum Ge-

misch zum reinen Zustand sei hier noch die Spur von ϱ^2 berechnet.

$$\text{Tr } \varrho^2 = \varrho_{ee}^2 + 2\varrho_{eg}\varrho_{ge} + \varrho_{gg}^2$$

Unter der Annahme von $\varrho_{ee}(0) = 1$ folgt mit (7.45):

$$\text{Tr } \varrho^2(t) = 1 - 2e^{-\gamma t} + 2e^{-2\gamma t} \quad (7.46)$$

Diese Zeitentwicklung ist in Abbildung 7.3 abgebildet. Der Betrag der Spur fällt von 1 rasch auf $\frac{1}{2}$ ab (vollständiges Gemisch) und nähert sich dann asymptotisch wieder der 1. Dieses Resultat gilt allerdings nicht, wenn man die Schwerpunktbewegung der Atome mitberücksichtigt. Durch den Impulsübertrag der Photonen entsteht ein Gemisch im p -Raum. Schematisch gilt

$$\begin{aligned} \varrho = |e, \mathbf{p}\rangle\langle e, \mathbf{p}| &\rightarrow |e, \mathbf{p}\rangle\langle e, \mathbf{p}| + \int d^3k |g, \mathbf{p} + \hbar\mathbf{k}\rangle\langle g, \mathbf{p} + \hbar\mathbf{k}| \delta(|\mathbf{k}| - \frac{\omega_0}{c}) \\ &\rightarrow \int d^3k |g, \mathbf{p} + \hbar\mathbf{k}\rangle\langle g, \mathbf{p} + \hbar\mathbf{k}| \delta(|\mathbf{k}| - \frac{\omega_0}{c}) \end{aligned} \quad (7.47)$$

7.5 Vermeidung spontaner Emission durch Interferenz

Betrachte ein 3-Niveau-Atom in V-Konfiguration:

$$\begin{array}{c} \underline{|+\rangle} \quad \underline{|-\rangle} \\ \\ \underline{|g\rangle} \\ E_e = E_+ = E_- \end{array}$$

In der allgemeinen Master-Gleichung (7.39) für Atome findet man einen Term

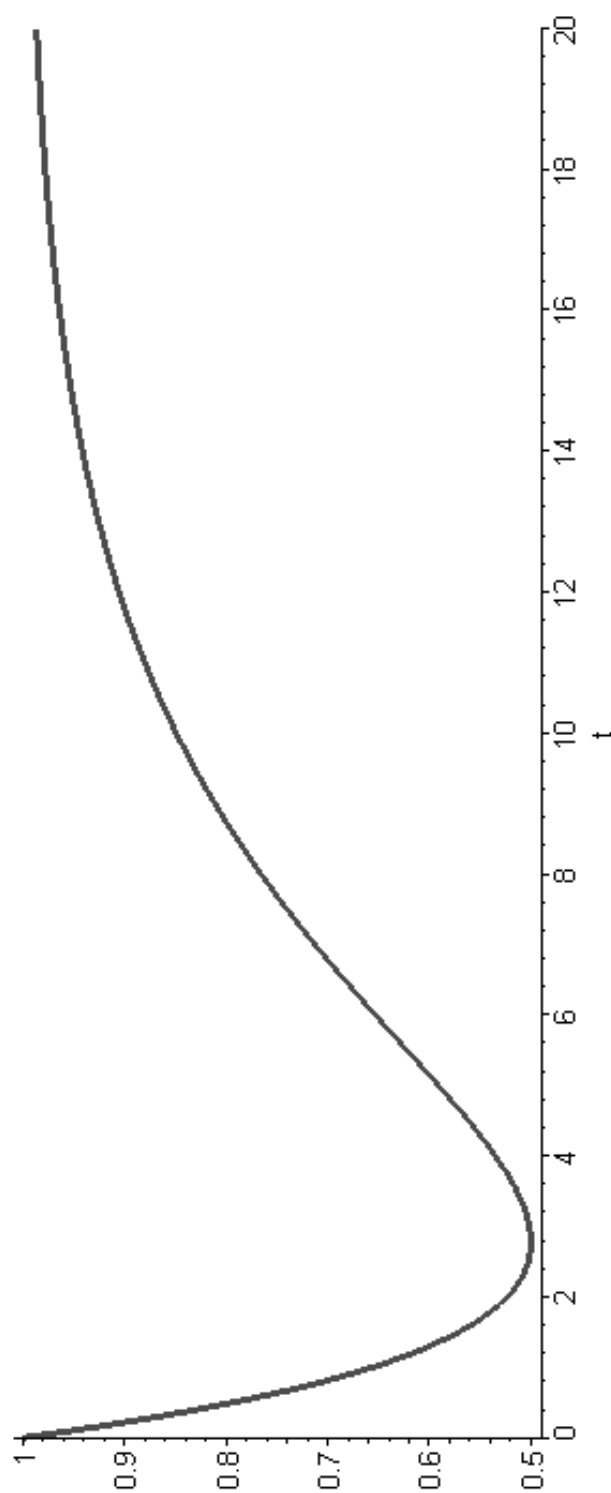
$$\begin{aligned} \mathbf{K}_i^{(+)} + i\mathbf{K}_i'^{(+)} &= \int_0^\infty d\tau \mathbf{d}_j^{(+)}(\tau) \langle 0 | E_j^{(+)}(\tau) E_i^{(-)}(\tau) | 0 \rangle \\ &= \sum_{m_e=\pm} |m_e\rangle\langle g| (\mathbf{d}_{meg})_i \underbrace{(K_{meg})}_{\in \mathbb{R}} + i \underbrace{K'_{meg}}_{\in \mathbb{R}} \end{aligned}$$

Da K_{meg} , K'_{meg} nur von $E_e - E_g$ abhängen, sind sie für beide Übergänge, $+\rightarrow g$ und $-\rightarrow g$, gleich.

$$\mathbf{K}^{(+)} + i\mathbf{K}'^{(+)} = (K + iK')\{|+\rangle\langle g| \mathbf{d}_{+g} + |-\rangle\langle g| \mathbf{d}_{-g}\}$$

Einsetzen in die Master-Gleichung ergibt:

$$\begin{aligned} i\hbar\dot{\varrho}_s &= [H_S, \varrho_s] \\ &- \frac{i}{\hbar} \left\{ \left[\mathbf{d}_{+g} |+\rangle\langle g| + \mathbf{d}_{-g} |-\rangle\langle g| \quad , \quad (K - iK') \right] (|g\rangle\langle +| \mathbf{d}_{+g}^* + |g\rangle\langle -| \mathbf{d}_{-g}^*) \varrho_s \right\} \\ &+ (K + iK') \left[\varrho_s (|+\rangle\langle g| \mathbf{d}_{+g} + |-\rangle\langle g| \mathbf{d}_{-g}) \quad , \quad \mathbf{d}_{+g}^* |g\rangle\langle +| + \mathbf{d}_{-g}^* |g\rangle\langle -| \right] \end{aligned}$$

Abbildung 7.3: Plot von $\text{Tr } \varrho^2$ bei spontaner Emission

Unter der Annahme ⁴ $\mathbf{d}_+ = \mathbf{d}_- = \mathbf{d}$ vereinfacht sich dies zu

$$i\hbar\dot{\varrho}_s = [H_S, \varrho_s] - \frac{i}{\hbar} |\mathbf{d}|^2 \left\{ (K - iK') \left[(|+\rangle + |-\rangle) \langle g|, |g\rangle (\langle +| + \langle -|) \varrho_s \right] \right. \\ \left. + (K + iK') \left[\varrho_s (|+\rangle + |-\rangle) \langle g|, |g\rangle (\langle +| + \langle -|) \right] \right\} \quad (7.48)$$

Die Atome seien in angeregtem Zustand $|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|+\rangle - |-\rangle)$ präpariert:

$$\varrho_s(0) = |\psi\rangle\langle\psi|, \quad H_S |\psi\rangle = E_e |\psi\rangle \rightarrow [H_S, \varrho_s(0)] = 0$$

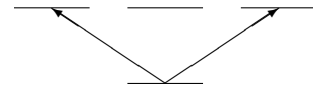
Außerdem gilt: $(\langle +| + \langle -|) |\psi\rangle = 0$. Wegen des Terms $\varrho_s(|+\rangle + |-\rangle) = 0$ in den Kommutatoren in Gleichung (7.48) gilt damit

$$\dot{\varrho}_s = 0$$

$\Rightarrow |\psi\rangle$ kann nicht in den Grundzustand zerfallen!

- Die destruktive Interferenz zwischen den Amplituden von $|+\rangle$ und $|-\rangle$ sorgt dafür, daß dieser Zustand stabil ist [13].
- Der Effekt ist ähnlich wie beim Dunkelzustand, nur daß $|\psi\rangle$ ein angeregter Zustand ist und für alle Photonen dunkel ist.
- Die Realisierung ist schwierig, da bei Atomen $\mathbf{d}_+ = e^{i\alpha} \mathbf{d}_-$ nicht erfüllbar ist, denn die Zustände sind Eigenzustände von J_z

Beispiel: Drei-Niveau-System in V-Konfiguration:



$$J_g = 0 \quad J_e = 1$$

Es gilt:

$$\begin{aligned} \mathbf{d}_+ &= \mathcal{D}(\mathbf{e}_x - i\mathbf{e}_y)/\sqrt{2} && \text{koppelt an } \sigma_+ \text{-Licht} \\ \mathbf{d}_- &= \mathcal{D}(\mathbf{e}_x + i\mathbf{e}_y)/\sqrt{2} && \text{koppelt an } \sigma_- \text{-Licht} \end{aligned}$$

Damit ist $\mathbf{d}_+ \cdot \mathbf{d}_-^* = 0$, Interferenzterme treten nicht auf. Beispielsweise gilt

$$(|+\rangle \mathbf{d}_+ + |-\rangle \mathbf{d}_-) \langle g| \cdot |g\rangle (\langle +| \mathbf{d}_+^* + \langle -| \mathbf{d}_-^*) = \mathcal{D}^2(|+\rangle\langle +| + |-\rangle\langle -|)$$

statt wie im oben angenommenen Fall $\mathbf{d}_+ = \mathbf{d}_-$

$$\mathcal{D}^2(|+\rangle + |-\rangle)(\langle +| + \langle -|)$$

- Bei Molekülen ist die destruktive Interferenz im Prinzip möglich. Ein experimenteller Nachweis wurde erbracht [14], aber später angezweifelt [15].

⁴Möglich ist auch $\mathbf{d}_+ = e^{i\alpha} \mathbf{d}_-$

Kapitel 8

Laser-Kühlen von Atomen

8.1 Allgemeines zur Kühlung von Atomen

Nach dem Satz von Liouville kann man die Entropie eines abgeschlossenen (Quanten)-Systems nicht ändern, da es sich unitär entwickelt. Adiabatisches Kühlen zur Verringerung der Temperatur ist zwar möglich (siehe Übungen), die Entropie („Unordnung“) bleibt dabei aber erhalten.

Um die Unordnung zu verringern bzw. das von den Atomen besetzte Phasenraumvolumen zu verkleinern muss das System offen sein. Die Beschreibung des Systems kann dann durch eine Master-Gleichung erfolgen.

Verschiedene Konzepte der Kühlung

- Austausch von Atomen mit der Umgebung. z.B. Verdampfungskühlen wie bei der Kaffeetasse (bzw. bei Corinnas Teetasse). Hierbei befinden sich die Atome in einem Potentialtopf endlicher Tiefe. Nur die heißesten Atome haben genug Energie, um den Topf zu verlassen. Die verbliebenen Atome sind dann im Mittel kälter. Durch Stöße zwischen den Atomen werden die Atome rethermalisiert, so dass die Energieverteilung wieder thermisch wird.
- Spontan emittierte Photonen dissipieren Energie und Impuls. (Induzierte Emission tut dies nicht, da dies ein unitärer Prozess ist). \iff Laser-Kühlen. Nobelpreis 1997 an Claude Cohen-Tannoudji, Steve Chu und Bill Phillips

Eine ausgezeichnete Einführung in die Konzepte der Laserkühlung kann man in Ref. [11] finden.

8.2 Doppler-Kühlung

Die Doppler-Kühlung ist die grundlegendste Form der Laser-Kühlung (Lethokov, Hänsch und Schawlow 1975).

8.2.1 Das Prinzip

Die Anregungswahrscheinlichkeit der Atome hängt von der Laser-Frequenz ab (siehe Übungen).

$$\varrho_{ee} = \frac{|\Omega|^2}{\Delta^2 + \frac{\gamma^2}{4} + 2|\Omega|^2} \quad (8.1)$$

wobei $\Delta = \omega_L - \omega_0$ und Ω die Rabi-Frequenz ist. Der mittlere absorbierte Impuls ist $\hbar \mathbf{k}_L \varrho_{ee}(\omega_L)$.

Bewegt sich das Atom mit der Geschwindigkeit \mathbf{v} , so nimmt es eine durch den Doppler-Effekt verschobene Laser-Frequenz $\omega'_L = \omega_L - \mathbf{k}_L \cdot \mathbf{v}$ wahr:

- für \mathbf{v} parallel zu \mathbf{k}_L ist ω'_L rotverschoben ($\omega'_L < \omega_L$)
- für \mathbf{v} antiparallel zu \mathbf{k}_L ist ω'_L blauverschoben ($\omega'_L > \omega_L$)

Nun wählt man $\Delta_L = \omega_L - \omega_0 < 0$, also einen rotverstimmten Laser. Für Atome, die auf den Laser zufliegen, ist die Verstimmung gegeben durch

$$\Delta' = \omega'_L - \omega_0 = \omega_L - \mathbf{k}_L \cdot \mathbf{v} - \omega_0 = \Delta_L - \mathbf{k}_L \cdot \mathbf{v} \quad (8.2)$$

so dass $|\Delta'| < |\Delta_L|$ (solange v nicht zu groß ist). Ein rotverstimmter Laser regt deshalb vornehmlich Atome an, die auf ihn zufliegen.

Bei zwei gegenläufigen rotverstimmten Laserstrahlen werden die Atome vornehmlich Photonen von dem Laserstrahl absorbieren, auf den sie zufliegen. Dadurch werden die Atome gekühlt.

8.2.2 Theoretische Beschreibung

Man beschreibt das Problem durch:

$$H = \frac{p^2}{2M} - \hbar \Delta |e\rangle\langle e| - \hbar \Omega(\mathbf{x}) |e\rangle\langle g| - \hbar \Omega^*(\mathbf{x}) |g\rangle\langle e| \quad (8.3)$$

(Zwei-Niveau-Atom mit Schwerpunktbewegung im Laserfeld). Zu lösen ist die DGL:

$$\dot{\varrho} = -\frac{i}{\hbar} [H, \varrho] - \frac{\gamma}{2} \{ \sigma_+ \sigma_- \varrho + \varrho \sigma_+ \sigma_- - 2 \overline{\sigma_- \varrho \sigma_+} \} \quad (8.4)$$

Der letzte Term $\overline{\sigma_- \varrho \sigma_+}$ ist dabei anders als im vorigen Kapitel, da der Impulsübertrag der spontan emittierten Photonen berücksichtigt werden muss:

$$\sigma_- \varrho \sigma_+ = |g\rangle\langle g| \varrho_{ee} \quad (8.5)$$

$$\overline{\sigma_- \varrho \sigma_+} = \int \frac{d^2 \Omega}{8\pi/3} \left(1 - |\hat{\mathbf{d}}_{eg} \cdot \hat{\mathbf{k}}|^2 \right) e^{i\mathbf{k}\mathbf{x}} \hat{\varrho}_{ee} e^{-i\mathbf{k}\mathbf{x}} |g\rangle\langle g| \quad (8.6)$$

Wobei $\left(1 - |\hat{\mathbf{d}}_{eg} \cdot \hat{\mathbf{k}}|^2 \right)$ die Dipol-Charakteristik beschreibt, $e^{i\mathbf{k}\mathbf{x}}$ den Impulsübertrag von $\hbar \mathbf{k}$, $\hat{\varrho}_{ee}$ ist $\langle e | \hat{\varrho} | e \rangle$. Herleitung: Siehe Ref. [12]. Dieser Term „heizt“ die Atome, da er Δp um etwa

$\hbar k$ vergrößert.

Lösungsidee für die Mastergleichung

Verwende die Born-Oppenheimer Näherung (oder adiabatische Näherung): Die Schwerpunktbewegung ist viel langsamer als die elektronische Relativbewegung, daher löst man das elektronische Problem für fixiertes \mathbf{x} und setzt dies in die Schwerpunkt-DGL ein.

Die interne Zeitentwicklung ist sogar so schnell, dass man einfach die stationäre elektromagnetische Lösung nehmen kann.

$$\dot{\varrho} \stackrel{!}{=} 0 = -\frac{i}{\hbar} [H, \varrho] - \frac{\gamma}{2} \{ \sigma_+ \sigma_- \varrho + \varrho \sigma_+ \sigma_- - 2 \sigma_- \varrho \sigma_+ \} \quad (8.7)$$

mit

$$H = \hbar \begin{pmatrix} -\Delta & -\Omega(\mathbf{x}) \\ -\Omega^*(\mathbf{x}) & 0 \end{pmatrix} \quad (8.8)$$

Die Lösung dieses Problems ist:

$$\varrho_{ee} = \frac{|\Omega|^2}{L} \quad \varrho_{eg} = -\frac{\Omega (\Delta - i\frac{\gamma}{2})}{L} = \varrho_{ge}^* \quad (8.9)$$

wobei $L := \Delta_L^2 + \frac{\gamma^2}{4} + 2|\Omega|^2$. Dies setzt man in die Schwerpunktbewegung ein und lässt hier der Einfachheit halber den dissipativen Term $\int \frac{d^2\Omega}{8\pi/3} \dots$ weg (weiter unten werden wir ihn phänomenologisch wieder einführen). So ergibt sich:

$$H = \frac{p^2}{2M} - \mathbf{d} \cdot \mathbf{E}(\mathbf{x}) + \text{innere Zustände} \quad (8.10)$$

Daraus folgen:

$$\dot{\mathbf{x}} = \frac{\mathbf{p}}{M} \quad (8.11)$$

$$\dot{\mathbf{p}} = \nabla(\mathbf{d} \cdot \mathbf{E}(\mathbf{x})) \quad (8.12)$$

Dies sind die Heisenberg-Bewegungsgleichungen für \mathbf{x} und \mathbf{p} .

Wir benutzen wieder die RWA:

$$\begin{aligned} \mathbf{d} \cdot \mathbf{E}(\mathbf{x}) &\stackrel{\text{RWA}}{=} \mathbf{d}_{eg} \cdot \mathbf{E}^{(+)}(\mathbf{x}) |e\rangle\langle g| + \mathbf{d}_{eg}^* \cdot \mathbf{E}^{(-)}(\mathbf{x}) |g\rangle\langle e| \\ &= \hbar\Omega(\mathbf{x}) |e\rangle\langle g| + \hbar\Omega^*(\mathbf{x}) |g\rangle\langle e| \end{aligned} \quad (8.13)$$

Der Mittelwert über die inneren Freiheitsgrade ergibt

$$\begin{aligned} \dot{\mathbf{p}} &= \text{Tr}_{2 \times 2}(\varrho \dot{\mathbf{p}}) \\ &= \hbar \text{Tr}_{2 \times 2}(\varrho \{ |e\rangle\langle g| \nabla\Omega(\mathbf{x}) + |g\rangle\langle e| \nabla\Omega^*(\mathbf{x}) \}) \\ &= \hbar(\nabla\Omega(\mathbf{x}))\varrho_{ge} + \hbar(\nabla\Omega^*(\mathbf{x}))\varrho_{eg} \end{aligned} \quad (8.14)$$

Einsetzen von ϱ_{eg} und $\varrho_{ge} = \varrho_{eg}^* = -\frac{\Omega^*(\Delta + i\frac{\gamma}{2})}{L}$.

$$\begin{aligned}\dot{\mathbf{p}} = \bar{\mathbf{F}} &= -\hbar\Delta_L \frac{\nabla(|\Omega|^2)}{L} - i\hbar\frac{\gamma}{2} \frac{\Omega^*(\nabla\Omega) - \Omega(\nabla\Omega^*)}{L} \\ &= -\frac{\hbar\Delta_L}{2} \nabla \ln \left(\Delta_L^2 + \frac{\gamma^2}{4} + 2|\Omega|^2 \right) - i\frac{\hbar\gamma}{2} \frac{\Omega^*(\nabla\Omega) - \Omega(\nabla\Omega^*)}{\Delta_L^2 + \frac{\gamma^2}{4} + 2|\Omega|^2}\end{aligned}\quad (8.15)$$

Der erste Term ist eine konservative Kraft (da $= \nabla \dots$), der zweite Term stellt eine dissipative Kraft dar.

$$\mathbf{F} = -\hbar\Delta_L \frac{1}{2} \nabla \ln \left(\Delta_L^2 + \frac{\gamma^2}{4} + 2|\Omega|^2 \right) - i\hbar\frac{\gamma}{2} \frac{\Omega^*\nabla\Omega - \Omega\nabla\Omega^*}{\Delta_L^2 + \frac{\gamma^2}{4} + 2|\Omega|^2}\quad (8.16)$$

Beispiel 1: laufende Laserwelle: $\Omega = \Omega_0 \cdot e^{i\mathbf{k}\mathbf{x}}$, $|\Omega|^2 = \Omega_0^2 \in \mathbb{R}$

$$\Rightarrow \mathbf{F} = \hbar\mathbf{k} \frac{\gamma\Omega_0^2}{\Delta_L^2 + \frac{\gamma^2}{4} + 2\Omega_0^2} = \hbar\mathbf{k}\gamma\varrho_{ee}\quad (8.17)$$

Doppler-Effekt:

$$\begin{aligned}\Delta_L &\longrightarrow \Delta_L - \mathbf{k}\mathbf{v} = \Delta_L - \frac{\mathbf{p}\mathbf{k}}{M} \\ \Rightarrow \mathbf{F} &= \hbar\mathbf{k} \frac{\gamma\Omega_0^2}{\left(\Delta_L - \frac{\mathbf{k}\mathbf{p}}{M}\right)^2 + \frac{\gamma^2}{4} + 2\Omega_0^2}\end{aligned}\quad (8.18)$$

Beispiel 2: Zwei gegenläufige Laser. Wir behandeln das Problem vereinfacht, indem wir die Kräfte von $\Omega_1 = \Omega_0 e^{i\mathbf{k}\mathbf{x}}$ und $\Omega_2 = \Omega_0 e^{-i\mathbf{k}\mathbf{x}}$ addieren ¹.

$$\begin{aligned}\mathbf{F} &= \mathbf{F}_{\rightarrow} + \mathbf{F}_{\leftarrow} \\ &= \hbar\mathbf{k}\gamma\Omega_0^2 \frac{4\Delta_L \cdot \frac{\mathbf{k}\mathbf{p}}{M}}{[(\Delta_L - \frac{\mathbf{k}\mathbf{p}}{M})^2 + \frac{\gamma^2}{4}][(\Delta_L + \frac{\mathbf{k}\mathbf{p}}{M})^2 + \frac{\gamma^2}{4}]}\end{aligned}\quad (8.19)$$

(für $\Omega_0 \ll \gamma$). Dabei ist $\mathbf{F}_{\leftarrow} = \mathbf{F}_{\rightarrow}(-\mathbf{k})$. Für kleines p gilt

$$\mathbf{F} \approx \frac{4\hbar\mathbf{k}}{M} \gamma\Omega_0^2 \mathbf{k}\mathbf{p} \frac{\Delta_L}{\left(\Delta_L^2 + \frac{\gamma^2}{4}\right)^2} \sim \mathbf{p}$$

In Richtung von \mathbf{k} haben wir $Fp < 0$ für $\Delta_L < 0$, so dass aus der Bewegungsgleichung $\dot{p} = F$ die Zeitentwicklung $p(t) \sim e^{-\alpha t}$ abgeleitet werden kann. Der mittlere Impuls wird somit abgebremst. Wegen $F \sim \gamma$ ist dafür die spontane Emission notwendig. Die maximale Kraft \hat{F} wird erreicht für $\Delta_L = -\frac{\gamma}{2}$ und ist gegeben durch $\hat{F} = -8 \frac{\hbar k^2}{M} \frac{\Omega_0^2}{\gamma^2} p$.

¹Eigentlich muss man $\Omega = \Omega_0 \cos(kx)$ setzen und völlig anders weiterrechnen. Dies führt zu komplizierten Berechnungen. Qualitativ richtig und viel einfacher ist der Zugang, den wir hier verwenden.

Diese Kraft muss verglichen werden mit der (noch nicht berücksichtigten) Heizrate, die sich durch den Impulsübertrag der spontan emittierten Photonen ergibt. (\implies Impulsverteilung wird verbreitert).

Heizrate intuitiv: die Breite der Impulsverteilung ist definiert als $\sigma^2 = \langle p^2 \rangle - \langle p \rangle^2$. Ihre durch das Heizen verursachte zeitliche Änderung genügt

$$\begin{aligned} \left. \frac{d}{dt} \sigma^2 \right|_{\text{Heiz}} &= \text{Anregungswahrscheinlichkeit} \cdot \text{Emissionsrate} \cdot \text{Impulsübertrag}^2 \\ &= \varrho_{ee} \cdot \gamma \cdot \hbar^2 k^2 \end{aligned}$$

Somit erhalten wir für die gesamte (Kühlen und Heizen) Änderung den Ausdruck

$$\left. \frac{d}{dt} \sigma^2 = \underbrace{\frac{d}{dt} p^2}_{2p\dot{p}} + \underbrace{\frac{d}{dt} \sigma^2}_{\gamma \varrho_{ee} \hbar^2 k^2} \right|_{\text{Heiz}}$$

Betrachten wir die Situation für die maximale Kühlungskraft, also $\Delta_L = -\gamma/2$, so ist die Anregungswahrscheinlichkeit durch $\varrho_{ee} = 2\Omega_0^2/\gamma^2$ gegeben. Im Gleichgewicht muß $-2pF = \gamma \hbar^2 k^2 \cdot 2\Omega_0^2/\gamma^2$ gelten, so dass man auf

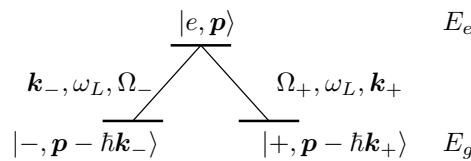
$$\frac{p^2}{2M} = \frac{\hbar\gamma}{16} = \frac{1}{2} k_B T$$

schließen kann. Das stimmt bis auf einen numerischen Faktor. Das richtige Ergebnis ist das sog. Doppler-Limit:

$$\boxed{k_B T = \hbar\gamma} \quad \gamma \approx 10^7 \text{ s}^{-1} \implies T \approx 10^{-4} \text{ K} \quad (8.20)$$

8.3 VSCPT

Velocity-selective coherent population trapping [19] verwendet Dunkelzustände zum Kühlen und kann erst bei tiefen Temperaturen eingesetzt werden ($< 10 \mu\text{K}$). Die Methode liefert dafür sehr tiefe Endtemperaturen (3 nK). Betrachte ein Λ -System mit Schwerpunktbewegung:



Dabei gilt: $E_+ = E_- = E_g$, $\Delta = \omega_L - (E_e - E_g)/\hbar$, $|\mathbf{k}_+| = |\mathbf{k}_-| = k$

$$\begin{aligned} H &= \frac{\hat{p}^2}{2M} \mathbf{1} - \hbar\Delta |e\rangle \langle e| \\ &+ \hbar\Omega_- [e^{i\mathbf{k}_-\cdot\mathbf{x}} |e\rangle \langle -| + e^{-i\mathbf{k}_-\cdot\mathbf{x}} |- \rangle \langle e|] \\ &+ \hbar\Omega_+ [e^{i\mathbf{k}_+\cdot\mathbf{x}} |e\rangle \langle +| + e^{-i\mathbf{k}_+\cdot\mathbf{x}} |+ \rangle \langle e|] \\ &= H_0 + H_{\text{int}} \end{aligned} \quad (8.21)$$

$i\hbar |\dot{\psi}\rangle = H |\psi\rangle$, entwickle $|\psi\rangle$ gemäß

$$|\psi\rangle = \int d^3p \{ \psi_e(\mathbf{p}) |e, \mathbf{p}\rangle + \psi_+(\mathbf{p} - \hbar\mathbf{k}_+) |+, \mathbf{p} - \hbar\mathbf{k}_+\rangle + \psi_-(\mathbf{p} - \hbar\mathbf{k}_-) |-, \mathbf{p} - \hbar\mathbf{k}_-\rangle \}$$

Einsetzen \Rightarrow

$$i\hbar \partial_t \begin{pmatrix} \psi_e(\mathbf{p}) \\ \psi_+(\mathbf{p} - \hbar\mathbf{k}_+) \\ \psi_-(\mathbf{p} - \hbar\mathbf{k}_-) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\hbar\Delta + \frac{p^2}{2M} & \hbar\Omega_+ & \hbar\Omega_- \\ \hbar\Omega_+ & \frac{(\mathbf{p}-\hbar\mathbf{k}_+)^2}{2M} & 0 \\ \hbar\Omega_- & 0 & \frac{(\mathbf{p}-\hbar\mathbf{k}_-)^2}{2M} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_e(\mathbf{p}) \\ \psi_+(\mathbf{p} - \hbar\mathbf{k}_+) \\ \psi_-(\mathbf{p} - \hbar\mathbf{k}_-) \end{pmatrix} \quad (8.22)$$

\Rightarrow Im allgemeinen ist die Entartung von $|+\rangle, |-\rangle$ durch die Schwerpunktbewegung aufgehoben. Setze $\Omega_+ = \Omega_- = \Omega \Rightarrow$

$$|\psi_D(\mathbf{p})\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \{ |-, \mathbf{p} - \hbar\mathbf{k}_-\rangle - |+, \mathbf{p} - \hbar\mathbf{k}_+\rangle \} \quad (8.23)$$

ist ein Dunkelzustand im Sinne von $H_{\text{int}} |\psi_D(\mathbf{p})\rangle = 0$. Aber:

$$H_0 |\psi_D(\mathbf{p})\rangle = \left(\frac{p^2}{2M} + \frac{\hbar^2 k^2}{2M} \right) |\psi_D(\mathbf{p})\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}} \left\{ -\frac{\hbar\mathbf{k}_-\mathbf{p}}{M} |-, \mathbf{p} - \hbar\mathbf{k}_-\rangle + \frac{\hbar\mathbf{k}_+\mathbf{p}}{M} |+, \mathbf{p} - \hbar\mathbf{k}_+\rangle \right\}$$

$$\mathbf{k} := \mathbf{k}_+ = \mathbf{k}_- \Rightarrow H_0 |\psi_D(\mathbf{p})\rangle = \frac{(\mathbf{p} - \hbar\mathbf{k})^2}{2M} |\psi_D(\mathbf{p})\rangle : \text{Eigenzustand}$$

$$\mathbf{k} := \mathbf{k}_+ = -\mathbf{k}_- \Rightarrow H_0 |\psi_D(\mathbf{p})\rangle = \frac{(\mathbf{p}^2 + \hbar^2 \mathbf{k}^2)}{2M} |\psi_D(\mathbf{p})\rangle - \frac{\hbar\mathbf{k}\mathbf{p}}{M} |\psi_B(\mathbf{p})\rangle$$

\Rightarrow Bei gegenläufigen Lasern ($\mathbf{k}_+ = -\mathbf{k}_-$) ist nur $|\psi_D(0)\rangle$ ein Eigenzustand von $H_0 + H_{\text{int}}$. Dies führt uns zur Idee von VSCPT:

- Atome werden von den Lasern nach $|e\rangle$ angeregt und fallen via spontaner Emission zurück.
- Atome, die nach $|\psi_B(\mathbf{p})\rangle$ fallen, werden wieder hochgepumpt
- Atome, die nach $|\psi_D(\mathbf{p} \neq 0)\rangle$ fallen, entwickeln sich erst zu $|\psi_B(\mathbf{p})\rangle$ und werden dann gepumpt
- Atome in $|\psi_D(\mathbf{p} = 0)\rangle$ bleiben dort: Kühlung.

Kapitel 9

Elektromagnetisch induzierte Transparenz

EIT ist einer von vielen Effekten in der Quanten-Optik, bei denen Licht den Zustand der Atome und somit seinen Brechungsindex ändert. Grundlage sind dabei die

9.1 Maxwell-Bloch-Gleichungen

Gleichung für Atome: $\dot{\rho} = \mathcal{L}\rho$ wie in Kapitel 7 für die Kopplung zwischen Licht und Atomen:

$$\begin{aligned} H &= H_A + H_{\text{Rad}} - \frac{1}{\epsilon_0} \int \mathbf{P}(\mathbf{x}) \cdot \mathbf{D}(\mathbf{x}) d^3x \\ \mathbf{P}(\mathbf{x}) &= \text{Polarisation, z.B. für ein Atom Ort } \mathbf{x}_0 : \\ \mathbf{P}(\mathbf{x}) &= \hat{\mathbf{d}} \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}_0) \end{aligned} \quad (9.1)$$

Heisenbergsche Bewegungsgleichungen (wie in Kapitel 2):

$$\begin{aligned} i\hbar \dot{\mathbf{D}}(\mathbf{x}) &= [\mathbf{D}(\mathbf{x}), H] \text{ mit} \\ [D_i(\mathbf{x}), B_j(\mathbf{x}')] &= -i\hbar \epsilon_{ijk} \partial_k \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \end{aligned} \quad (9.2)$$

Daraus ergibt sich:

$$\dot{\mathbf{D}} = \frac{1}{\mu_0} \text{rot } \mathbf{B} \quad (9.3)$$

$$\dot{\mathbf{B}} = -\frac{1}{\epsilon_0} \text{rot } (\mathbf{D} - \mathbf{P}) \quad (9.4)$$

Das entspricht den Maxwell-Gleichungen¹ in einem Dielektrikum mit Polarisation \mathbf{P} . Daraus lassen sich nach dem aus den ersten Kapiteln bekannten Schema Wellengleichungen herleiten:

$$\left(\frac{1}{c^2} \partial_t^2 + \text{rot rot} \right) \mathbf{D} = \text{rot rot } \mathbf{P} \quad (9.5)$$

¹Wir nehmen an, dass die makroskopische freie Ladungsdichte verschwindet, so dass $\nabla \cdot \mathbf{D} = 0$. Man kann dann die Unterscheidung zwischen dem senkrechten Anteil der Verschiebungsdichte und der Verschiebungsdichte selbst fallenlassen.

Bzw. unter der Verwendung $\mathbf{D} = \varepsilon_0 \mathbf{E} + \mathbf{P}$

$$\left(\frac{1}{c^2} \partial_t^2 + \text{rot rot} \right) \mathbf{E} = -\mu_0 \ddot{\mathbf{P}} \quad (9.6)$$

Mit $\dot{\varrho} = \mathcal{L}\varrho$ zusammen bilden diese Gleichungen die *Maxwell-Bloch-Gleichungen*. Diese Gleichungen sind im Allgemeinen schwer zu lösen, weshalb Näherungen durchgeführt werden. Oft gemachte Annahmen sind:

- Homogen verteilte Atome

$$\Rightarrow \mathbf{P}(\mathbf{x}, t) = \mathbf{P}(t) \quad (9.7)$$

- Das atomare Gas hat eine so geringe Dichte, dass sich die Atome nicht gegenseitig beeinflussen und einzeln mit dem Licht wechselwirken.

$$\Rightarrow \mathbf{P}(t) = \bar{\varrho} \mathbf{d} \quad (9.8)$$

Dabei ist $\bar{\varrho}$ die Dichte der Atome und \mathbf{d} der Dipoloperator für ein einzelnes Atom.

Mitteln über die atomaren Freiheitsgrade ergibt:

$$\left(\frac{1}{c^2} \partial_t^2 + \text{rot rot} \right) \mathbf{E} = -\mu_0 \bar{\varrho} \langle \ddot{\mathbf{d}} \rangle \quad (9.9)$$

$$= -\frac{1}{c^2 \varepsilon_0} \bar{\varrho} \text{Tr}(\varrho \ddot{\mathbf{d}}) \quad (9.10)$$

Die Maxwell-Bloch-Gleichungen erlauben die Berechnung der optischen Eigenschaften eines Mediums von Atomen. Bei Gasen kann man zu einem gewissen Grad die Stöße und Wechselwirkung zwischen den Atomen vernachlässigen.

9.2 Der Brechungsindex von 2-Niveau-Atomen

Betrachte wie in Kapitel 8 ein 2-Niveau-Atom in einer laufenden Laserwelle:

$$\mathbf{E} = \mathbf{E}_0 e^{i\mathbf{k}\mathbf{x}} e^{-i\omega_L t} + \text{c.c.} \quad (9.11)$$

Die Laserwelle soll kontinuierlich eingeschaltet sein, so daß die Atome durch ihren stationären Zustand beschrieben werden können:

$$\begin{aligned} \varrho_{ee}^{st} &= \frac{|\Omega|^2}{\Delta^2 + \frac{\gamma^2}{4} + 2|\Omega|^2} \\ \varrho_{gg}^{st} &= 1 - \varrho_{ee}^{st} \\ \varrho_{eg}^{st} &= \frac{-\Omega(\Delta - i\frac{\gamma}{2})}{\Delta^2 + \frac{\gamma^2}{4} + 2|\Omega|^2} \\ \Delta &= \omega_L - \omega_0 \end{aligned} \quad (9.12)$$

Diese Lösung gilt für das “mitrotierende” Bezugssystem, in dem $\mathcal{H}_A = \hbar\Delta |e\rangle\langle e|$ ist. Um zum “Laborsystem” zu wechseln, müssen wir die entsprechende unitäre Transformation

$$U = \exp(-i\omega_L t |e\rangle\langle e|) \quad (9.13)$$

rückgängig machen:

$$\begin{aligned} \varrho(t) &= U(t)\varrho^{st}U^\dagger(t) \\ &= \sum_{i,j} \varrho_{ij}^{st} U |i\rangle\langle j| U^\dagger \\ &= \varrho_{ee}^{st} |e\rangle\langle e| + \varrho_{gg}^{st} |g\rangle\langle g| + \varrho_{eg}^{st} e^{-i\omega_L t} |e\rangle\langle g| + \varrho_{ge}^{st} e^{i\omega_L t} |g\rangle\langle e| \end{aligned} \quad (9.14)$$

$$\Rightarrow \text{Tr}(\varrho(t)\mathbf{d}) = \mathbf{d}_{eg}\varrho_{ge}(t) + \mathbf{d}_{eg}^*\varrho_{eg}(t) \quad (9.15)$$

Der Zusammenhang zwischen der Amplitude des elektrischen Feldes und der in der stationären Dichtematrix (9.12) auftretenden Rabi-Frequenz ist gegeben durch

$$\begin{aligned} \Omega(\mathbf{x}, t) &= \frac{1}{\hbar} \mathbf{d}_{eg} \cdot \mathbf{E}^{(+)}(t) \\ &= \frac{1}{\hbar} \mathbf{d}_{eg} \cdot \mathbf{E}_0 e^{i\mathbf{k}\mathbf{x}} e^{-i\omega_L t} \end{aligned} \quad (9.16)$$

Einsetzen in die Maxwell-Gleichungen ergibt

$$\begin{aligned} &\left(\frac{1}{c^2} \partial_t^2 + \text{rot rot} \right) (\mathbf{E}_0 e^{i\mathbf{k}\mathbf{x}} e^{-i\omega_L t} + \mathbf{E}_0^* e^{-i\mathbf{k}\mathbf{x}} e^{i\omega_L t}) \\ &= \frac{\omega_L^2 \bar{\varrho}}{c^2 \epsilon_0} \left(\mathbf{d}_{eg} (-1) \frac{\Delta + i\frac{\gamma}{2}}{\Delta^2 + \frac{\gamma^2}{4} + 2|\Omega_0|^2} e^{i\omega_L t} e^{-i\mathbf{k}\mathbf{x}} \frac{1}{\hbar} \mathbf{d}_{eg}^* \mathbf{E}_0^* \right. \\ &\quad \left. + \mathbf{d}_{eg}^* (-1) \frac{\Delta - i\frac{\gamma}{2}}{\Delta^2 + \frac{\gamma^2}{4} + 2|\Omega_0|^2} e^{-i\omega_L t} e^{i\mathbf{k}\mathbf{x}} \frac{1}{\hbar} \mathbf{d}_{eg} \mathbf{E}_0 \right) \end{aligned} \quad (9.17)$$

mit $\Omega_0 = \mathbf{d}_{eg} \cdot \mathbf{E}_0 / \hbar$. Machen wir nun die Annahme, daß $\mathbf{E}_0 = \text{const.}$ gilt. Koeffizientenvergleich von $e^{\pm i\omega_L t}$ liefert:

$$\frac{-\omega_L^2}{c^2} \mathbf{E}_0 - \mathbf{k} \times (\mathbf{k} \times \mathbf{E}_0) = \frac{-\bar{\varrho}\omega_L^2}{\hbar\epsilon_0 c^2} \mathbf{d}_{eg}^* (\mathbf{d}_{eg} \mathbf{E}_0) \frac{\Delta - i\frac{\gamma}{2}}{\Delta^2 + \frac{\gamma^2}{4} + 2|\Omega_0|^2} \quad (9.18)$$

Setze $\mathbf{d}_{eg} = \mathcal{D}\boldsymbol{\epsilon}^*$, $\mathbf{E}_0 = \mathcal{E}_0\boldsymbol{\epsilon}$ mit $\boldsymbol{\epsilon} \perp \mathbf{k}$:

$$\Rightarrow -\frac{\omega_L^2}{c^2} \mathcal{E}_0 \boldsymbol{\epsilon} + k^2 \boldsymbol{\epsilon} \mathcal{E}_0 = -\frac{\bar{\varrho}\omega_L^2}{\hbar\epsilon_0 c^2} \mathcal{D}^2 \boldsymbol{\epsilon} \mathcal{E}_0 \frac{\Delta - i\frac{\gamma}{2}}{\Delta^2 + \frac{\gamma^2}{4} + 2|\Omega_0|^2} \quad (9.19)$$

$$\Rightarrow -\frac{\omega_L^2}{c^2} + k^2 = \frac{-\bar{\varrho}\omega_L^2}{\hbar\epsilon_0 c^2} \mathcal{D}^2 \frac{\Delta - i\frac{\gamma}{2}}{\Delta^2 + \frac{\gamma^2}{4} + 2|\Omega_0|^2} \quad (9.20)$$

Dies ist eine Gleichung, die k mit ω_L verknüpft. ω_L ist vom Laser vorgegeben und muß auch innerhalb des Mediums denselben Wert annehmen, da sonst die Randbedingungen an der Grenze zwischen Medium und freiem Raum verletzt würden. k kann jedoch innerhalb des Mediums einen anderen Wert annehmen als $\frac{\omega_L}{c}$. Lösung:

$$k(\omega_L) = \sqrt{\frac{\omega_L^2}{c^2} - \frac{\omega_L^2}{c^2} \frac{\bar{\rho} \mathcal{D}^2}{\hbar \epsilon_0} \frac{\Delta - i\frac{\gamma}{2}}{\Delta^2 + \frac{\gamma^2}{4} + 2|\Omega_0|^2}} \quad (9.21)$$

wobei $\Delta = \omega_L - \omega_0$

Vergleiche dies mit der Definition des Brechungsindex:

$$k(\omega_L) = \frac{\omega_L}{c} n(\omega_L) \quad (9.22)$$

$$\Rightarrow n(\omega_L) = \sqrt{1 - \frac{\bar{\rho} \mathcal{D}^2}{\hbar \epsilon_0} \frac{\Delta - i\frac{\gamma}{2}}{\Delta^2 + \frac{\gamma^2}{4} + 2|\Omega_0|^2}} \quad (9.23)$$

Für kleine Dichten: Näherung $\sqrt{1-x} = 1 - \frac{1}{2}x \Rightarrow$

$$n(\omega_L) = 1 - \frac{1}{2} \frac{\bar{\rho} \mathcal{D}^2}{\hbar \epsilon_0} \frac{\Delta - i\frac{\gamma}{2}}{\Delta^2 + \frac{\gamma^2}{4} + 2|\Omega_0|^2} \quad (9.24)$$

Der Brechungsindex ist im Allgemeinen komplex, $n = n' + in''$

$$\begin{aligned} \Rightarrow \mathbf{E}^{(+)} &= \mathbf{E}_0 e^{-i\omega_L t} e^{i\mathbf{k}\mathbf{x} \frac{\omega_L}{c} (n' + in'')} \\ &= \mathbf{E}_0 e^{-i\omega_L t} e^{i\mathbf{k}'\mathbf{x}} e^{-\mathbf{k}''\mathbf{x}} \end{aligned} \quad (9.25)$$

- Der Realteil n' bestimmt die Phasengeschwindigkeit $v_{ph} = \frac{\omega}{\text{Re } k}$ des Lichts. Bei Verschwinden des Detunings wird daraus $v(\Delta = 0) = c$.
- Gruppengeschwindigkeit: Betrachte das Wellenpaket

$$E(x, t) = \int d\omega e^{ik(\omega)x} e^{-i\omega t} E(\omega) \quad (9.26)$$

Schmale Frequenzbreite, d.h. $\omega \approx \omega_0$, erlaubt die Entwicklung

$$k(\omega) \approx k(\omega_0) + \left. \frac{\partial k}{\partial \omega} \right|_{\omega_0} (\omega - \omega_0) + \dots \quad (9.27)$$

$$\begin{aligned} \Rightarrow E(x, t) &= \int d\omega E(\omega) e^{-i\omega t} e^{ik(\omega_0)x} e^{i \left. \frac{\partial k}{\partial \omega} \right|_{\omega_0} (\omega - \omega_0)x} \\ &= e^{ik(\omega_0)x} e^{-i \left. \frac{\partial k}{\partial \omega} \right|_{\omega_0} \omega_0 x} \int d\omega E(\omega) e^{-i\omega(t - \left. \frac{\partial k}{\partial \omega} \right|_{\omega_0} x)} \end{aligned} \quad (9.28)$$

Daraus folgt: Das Paket läuft mit der Geschwindigkeit

$$\frac{x}{t} = \text{const.} = \left(\frac{\partial k}{\partial \omega} \right)^{-1} \bigg|_{\omega_0} = \frac{\partial \omega}{\partial k} \bigg|_{\omega_0} \quad (9.29)$$

was der Gruppengeschwindigkeit $v_{gr} = (\frac{\partial k}{\partial \omega})^{-1}$ entspricht. Diese ändert sich besonders stark um $\Delta = 0$ herum. Allerdings: n'' beschreibt die Absorption und wird ebenfalls für $\Delta = 0$ maximal, so dass man nicht mehr von einer wirklichen Propagation des Lichts sprechen kann. Der Begriff der Gruppengeschwindigkeit wird dann unsinnig.

- “Spectral hole burning”: $|\Omega_0|^2 \sim \text{Lichtintensität}$; daraus folgt, daß hohe Intensitäten selbst bei $\Delta = 0$ die Absorption stark unterdrücken. Grund: Wenn alle Atome angeregt sind können die verbleibenden Photonen nicht mehr absorbiert werden.

9.3 Elektromagnetisch induzierte Transparenz und Dunkelzustände

Der Brechungsindex für Atome mit mehr als zwei Niveaus kann sehr von dem 2-Niveau-Ergebnis abweichen. Ein Beispiel dafür ist das Phänomen der elektromagnetisch induzierten Transparenz in einem Λ -System. Um den Brechungsindex herzuleiten, müssen wir wieder die Maxwell-Bloch-Gleichungen für ein Λ -System lösen.

$$\hat{H} = \hbar \begin{pmatrix} 0 & -\Omega_- & -\Omega_+ \\ -\Omega_-^* & \Delta_- & 0 \\ -\Omega_+^* & 0 & \Delta_+ \end{pmatrix} \quad \mathcal{L}_{\text{sp. Em.}} \hat{\varrho} = \begin{pmatrix} -\gamma \varrho_{ee} & -\frac{\gamma}{2} \varrho_{e-} & -\frac{\gamma}{2} \varrho_{e+} \\ -\frac{\gamma}{2} \varrho_{-e} & \frac{\gamma}{2} \varrho_{ee} & 0 \\ -\frac{\gamma}{2} \varrho_{+e} & 0 & \frac{\gamma}{2} \varrho_{ee} \end{pmatrix} \quad (9.30)$$

Also:

$$\dot{\varrho} = -\frac{i}{\hbar} [H, \varrho] + \mathcal{L}_{\text{sp. Em.}} \varrho \stackrel{!}{=} 0 \quad \text{stationäre Lösung} \quad (9.31)$$

Die Lösung dieses linearen Gleichungssystems zu finden ist im Prinzip einfach, das Ergebnis ist aber so umfangreich, daß es nicht mehr interpretierbar ist. Wir machen daher die Annahme, daß Ω_+ klein ist, und entwickeln um $\Omega_+ = 0$.

Die Lösung für $\Omega_+ = 0$ ist einfach der Dunkelzustand, also

$$\varrho_0 = |+\rangle\langle +| \quad (9.32)$$

Da $|+\rangle$ der Dunkelzustand für diese Situation ($\Omega_+ = 0$, $\Omega_- \neq 0$) ist, wird so die gesamte Population nach $|+\rangle$ gepumpt.

Wird nun der zweite Laser eingeschaltet ($\Omega_+ \neq 0$) so führt man eine störungstheoretische Rechnung durch: $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_1$ mit

$$\hat{H}_0 = \hbar \begin{pmatrix} 0 & -\Omega_- & 0 \\ -\Omega_-^* & \Delta_- & 0 \\ 0 & 0 & \Delta_+ \end{pmatrix} \quad \hat{H}_1 = \hbar \begin{pmatrix} 0 & 0 & -\Omega_+ \\ 0 & 0 & 0 \\ -\Omega_+^* & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (9.33)$$

Setzt man nun den Ansatz $\hat{\varrho} = \hat{\varrho}_0 + \hat{\varrho}_1 + O(\Omega_+^2)$ in (9.31) ein, so findet man

$$0 = -\frac{i}{\hbar}[H_0 + H_1, \varrho_0 + \varrho_1] + \mathcal{L}_{sp.Em.}\hat{\varrho}_0 + \mathcal{L}_{sp.Em.}\hat{\varrho}_1 \quad (9.34)$$

und da ϱ_0 die ungestörte Gleichung löst, verbleibt zur ersten Ordnung nur noch:

$$-\frac{i}{\hbar}[H_0, \varrho_1] + \mathcal{L}_{sp.Em.}\hat{\varrho}_1 = \frac{i}{\hbar}[H_1, \varrho_0] \quad (9.35)$$

Also ein inhomogenes lineares Gleichungssystem für $\hat{\varrho}_1$. Löst man dieses Gleichungssystem, dann findet man:

$$\varrho = \underbrace{|+\rangle\langle+|}_{\varrho_0} + \{\varrho_{e+}|e\rangle\langle+| + \varrho_{-+}|-\rangle\langle+| + \text{H.c.}\} \quad (9.36)$$

mit

$$\begin{aligned} \varrho_{e+} &= -\frac{(\Delta_- - \Delta_+)\Omega_+}{(\Delta_- - \Delta_+)(\Delta_+ + i\frac{\gamma}{2}) + |\Omega_-|^2} \\ \varrho_{-+} &= \frac{-\Omega_+\Omega_-^*}{(\Delta_- - \Delta_+)(\Delta_+ + i\frac{\gamma}{2}) + |\Omega_-|^2} \end{aligned}$$

Berechne nun den Brechungsindex für den Ω_+ Laser mit Hilfe von Gleichung (9.9). Von der Herleitung des Brechungsindex für das Zwei-Niveau-System in Abschnitt 9.2 her wissen wir, daß gilt ²

$$n_+ \approx 1 + \frac{\bar{\varrho}\mathcal{D}}{2\hbar\varepsilon_0} \text{Tr}(\hat{\mathbf{d}}^{(-)} \cdot \boldsymbol{\varepsilon}_{\Omega_+}^* \varrho) \frac{1}{\Omega_+} \quad (9.37)$$

Da für den Ω_+ Strahl $\hat{\mathbf{d}}^{(-)} \cdot \boldsymbol{\varepsilon}_{\Omega_+}^* \propto |+\rangle\langle e|$ gilt, folgt

$$n_+ \approx 1 - \frac{\bar{\varrho}\mathcal{D}^2}{2\hbar\varepsilon_0} \frac{\Delta_- - \Delta_+}{(\Delta_- - \Delta_+)(\Delta_+ + i\frac{\gamma}{2}) + |\Omega_-|^2} \quad (9.38)$$

Der dabei auftretende Vorfaktor ist charakteristisch für optisch dünne Gase und derselbe wie beim Zwei-Niveau-System. Der Bruch enthält den Effekt der elektromagnetisch induzierten Transparenz.

Für $\Delta_- = \Delta_+$ gilt $n = 1$, d. h. derselbe Brechungsindex wie im Vakuum; insbesondere findet keine Absorption statt. Das System verhält sich jedoch nicht vollständig wie das Vakuum, denn die rechte Seite der Gleichung ist nur bei Resonanz exakt Null. Außerhalb der Resonanz treten neue Effekte auf. Die Gruppengeschwindigkeit die mit $\frac{\partial\omega}{\partial k}$ zusammenhängt weicht auch für den Resonanzfall vom Vakuumwert ab.

²Die Herleitung dieser Gleichung verläuft völlig analog zur Herleitung von Gleichung (9.24).

Für $\Delta_- = \Delta_+$ gilt also $n = 1$ es tritt keine Absorption auf, denn die Atome sind fast alle im Dunkelzustand. Die Phasengeschwindigkeit entspricht der des Vakuums, nicht aber die Gruppengeschwindigkeit.

Betrachten wir den Fall $\Delta_- = 0$ (Pumplaser in Resonanz):

$$n_+ = 1 - \frac{\bar{\rho}\mathcal{D}^2}{2\hbar\varepsilon_0} \frac{(\omega_0 - \omega_+)}{(\omega_0 - \omega_+)(\omega_+ - \omega_0 + i\frac{\gamma}{2}) + |\Omega_-|^2} \quad (9.39)$$

Für den Wellenvektor gilt nun:

$$k_+(\omega_+) = \frac{\omega_+}{c} n_+(\omega_+) \quad (9.40)$$

Die Gruppengeschwindigkeit lässt sich damit leicht berechnen:

$$\left. \frac{\partial k_+}{\partial \omega_+} \right|_{\omega_+ = \omega_0} = \frac{n_+}{c} - \frac{\omega_+}{c} \frac{\partial n_+}{\partial \omega_+} = \dots = \frac{1}{c} + \frac{\omega_0}{c} \frac{\bar{\rho}\mathcal{D}^2}{2\hbar\varepsilon_0} \frac{1}{|\Omega_-|^2} \quad (9.41)$$

$$\Rightarrow v_{\text{gr}} = \frac{c}{1 + \frac{\bar{\rho}\mathcal{D}^2}{2\hbar\varepsilon_0} \frac{\omega_0}{|\Omega_-|^2}} \quad (9.42)$$

Theoretisch ist damit $v_{\text{gr}} = 0$ erreichbar (für $\Omega_- \rightarrow 0$), dann ist jedoch die obige Entwicklung eigentlich nicht mehr erlaubt.

Obwohl dieser Grenzfall nicht mehr von unserer Theorie beschreibbar ist (denn wir hatten $\Omega_+ \ll \Omega_-$ vorausgesetzt) ist er dennoch im Experiment erreicht worden.

Beispiel $\omega_0 = 10^{15} \text{ s}^{-1}$, $\mathcal{D} = ea_0$, $\bar{\rho} \approx 10^{21} \text{ m}^{-3}$, $\Omega_- \approx 10^8 \text{ s}^{-1}$ dann findet man für die Gruppengeschwindigkeit

$$v_{\text{gr}} = \frac{1}{3} 10^{-6} c \approx 100 \frac{\text{m}}{\text{s}} \quad (9.43)$$

In einem ersten Experiment erreichte die Gruppe von Lene Hau 1999 [20] $v_{\text{gr}} = 17 \text{ m/s}$. Ein Jahr später gelang es der Gruppe von Bill Philipps sogar, Licht zu stoppen [?]. Man kann mit dieser Methode einen Puls für eine Zeitdauer im Millisekundenbereich anhalten, ohne die Information durch inkohärente Prozesse zu verlieren. Dies könnte z. B. interessant sein für optische Computer. Zudem kann man das gestoppte Licht auf vielfältige Weise manipulieren, z. B. quetschen.

Das Stoppen kann dabei als Transfer der Atome von $|+\rangle$ nach $|-\rangle$ und anschließendem Abschalten des Pumplasers verstanden werden. Das Licht ist dann reversibel und kohärent gespeichert. Der Ω_+ -Puls kann nach bis zu einer Millisekunde wiederhergestellt werden [34].

Kapitel 10

Photonische Bandlücken

Photonic band gaps (PBG) treten in völliger Analogie zu den Bandlücken von Elektronen in periodischen Potentialen auf. Ihre Bedeutung ist, dass Photonen mit bestimmten Frequenzen in einem periodischen dielektrischen Medium nicht propagieren können. Sie entstehen bei periodischer Modulation des Brechungsindex. Zur Vereinfachung der Schreibweise führen wir die relative Dielektrizitätskonstante ε_r ein

$$\varepsilon_r(\mathbf{x}) = \frac{\varepsilon(\mathbf{x})}{\varepsilon_0} = n^2(\mathbf{x}) \quad n: \text{Brechungsindex} \quad (10.1)$$

von der wir annehmen, daß sie zeitlich konstant ist ($\dot{\varepsilon}_r \propto \dot{\varepsilon}(\mathbf{x}) = 0$), was einen von der Frequenz unabhängigen Brechungsindex impliziert. Es gilt dann

$$\mathbf{D} = \varepsilon_0 \mathbf{E} + \mathbf{P} = \varepsilon(\mathbf{x}) \mathbf{E} = \varepsilon_0 \varepsilon_r(\mathbf{x}) \mathbf{E}(\mathbf{x}) \quad (10.2)$$

und die Maxwell-Gleichungen lauten:

$$\dot{\mathbf{B}} = -\text{rot } \mathbf{E} \quad \dot{\mathbf{D}} = \varepsilon_0 c^2 \text{rot } \mathbf{B} \quad (10.3)$$

was auf eine „symmetrische“ Wellengleichung für \mathbf{B} führt:

$$\left(\partial_t^2 + c^2 \text{rot} \frac{1}{\varepsilon_r(\mathbf{x})} \text{rot} \right) \mathbf{B}(\mathbf{x}, t) = 0 \quad (10.4)$$

Betrachte nun einen periodischen Brechungsindex $\varepsilon_r(x) = \varepsilon_r(x + L)$, der der Einfachheit halber nur von x abhängen soll ¹. Um die Analogie zwischen photonischen und elektronischen Bandlücken möglichst klar herauszuarbeiten, soll die Wellengleichung für das Magnetfeld mit den bekannten Konzepten aus der Quantenmechanik behandelt werden

¹Im Folgenden schreiben wir trotzdem die volle Abhängigkeit $\varepsilon_r(\mathbf{x})$, wenn die entsprechende Gleichung auch im allgemeinen Fall gilt.

- Zunächst definieren wir ein erhaltendes Skalarprodukt (siehe auch Abschnitt 2.1.6), mit dessen Hilfe wir hermitesche Operatoren einführen können:

$$\langle \mathbf{B} | \mathbf{B}' \rangle := -i \frac{\varepsilon_0}{\hbar} \int d^3x (\dot{\mathbf{B}}^* \mathbf{B}' - \mathbf{B}^* \dot{\mathbf{B}}') \quad (10.5)$$

$$\Rightarrow \partial_t \langle \mathbf{B} | \mathbf{B}' \rangle \propto \int d^3x (\ddot{\mathbf{B}}^* \mathbf{B}' - \mathbf{B}^* \ddot{\mathbf{B}}') \quad (10.6)$$

eingesetzt in die Wellengleichung (10.4)

$$= \int d^3x \left[(-c^2 \operatorname{rot} \frac{1}{\varepsilon_r(\mathbf{x})} \operatorname{rot} \mathbf{B}^*) \mathbf{B}' - \mathbf{B}^* (-c^2 \operatorname{rot} \frac{1}{\varepsilon_r(\mathbf{x})} \operatorname{rot} \mathbf{B}') \right] \quad (10.7)$$

$$= \int d^3x \left[\mathbf{B}^* (-c^2 \operatorname{rot} \frac{1}{\varepsilon_r(\mathbf{x})} \operatorname{rot} \mathbf{B}') - \mathbf{B}^* (-c^2 \operatorname{rot} \frac{1}{\varepsilon_r(\mathbf{x})} \operatorname{rot} \mathbf{B}') \right] = 0 \quad (10.8)$$

Dabei wurde im letzten Schritt zwei mal partiell integriert, um die Rotation auf den gestrichenen Term zu schaufeln. In diese Rechnung ging insbesondere auch ein, dass $\varepsilon_r(\mathbf{x})$ unabhängig von der Zeit ist und dass es symmetrisch zwischen den beiden Rotations-Operatoren auftritt.

- Der “Hamilton”-Operator $H := -c^2 \operatorname{rot} \varepsilon_r(\mathbf{x})^{-1} \operatorname{rot}$ ist hermitisch, d. h. $\langle \mathbf{B}' | H \mathbf{B} \rangle = \langle H \mathbf{B}' | \mathbf{B} \rangle$. Zudem ist H periodisch, d. h. $H(\mathbf{x} + L) = H(\mathbf{x})$.

Um nun die Eigenmoden der Wellengleichung (10.4) zu finden, betrachten wir analog zur Festkörperphysik zunächst den Translationsoperator

$$T_{\mathbf{x}_0} = e^{i\hat{\mathbf{p}} \cdot \mathbf{x}_0 / \hbar} = e^{\mathbf{x}_0 \cdot \nabla_{\mathbf{x}}} \quad (10.9)$$

$$\text{Wirkung des Operators:} \quad (T_{\mathbf{x}_0} f)(\mathbf{x}) = f(\mathbf{x} + \mathbf{x}_0) \quad (10.10)$$

$$\begin{aligned} \text{Bew.:} \quad T_{\mathbf{x}_0} f(\mathbf{x}) &= e^{\mathbf{x}_0 \cdot \nabla_{\mathbf{x}}} f(\mathbf{x}) \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(\mathbf{x}_0 \cdot \nabla_{\mathbf{x}})^n}{n!} f(\mathbf{x}) \equiv \text{Taylor-Reihe um } \mathbf{x} \\ &= f(\mathbf{x} + \mathbf{x}_0) \end{aligned} \quad (10.11)$$

H vertauscht mit T_L , denn

$$(HT_L - T_L H)f(\mathbf{x}) = Hf(\mathbf{x} + L) - H(\mathbf{x} + L)f(\mathbf{x} + L) = 0 ,$$

da H periodisch ist. Also hat H ein gemeinsames System von Eigenfunktionen mit T_L .

Die Eigenzustände von T_L sind die Impulseigenzustände e^{ikx} mit zugehörigen Eigenwerten $T_L e^{ikx} = e^{ik(x+L)} = e^{ikL} e^{ikx}$. Das heißt, es liegt eine ∞ -fache Entartung der Eigenwerte vor. Für alle $k = q + \frac{2n\pi}{L}$, $n \in \mathbb{Z}$ ergibt sich derselbe Eigenwert $\exp(iqL)$.

Die Eigenzustände von H können nach einem Satz entarteter Eigenwerte von T_L entwickelt werden und haben daher die Form

$$\psi_q(x) = e^{iqx} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \psi_{q,n} e^{i \frac{2n\pi}{L} x} \quad (10.12)$$

Die Quantenzahl q kann aus $[-\frac{\pi}{2}, \frac{\pi}{2}]$ gewählt werden². q heißt *Quasi-Impuls* (= Impuls modulo $2\pi/L$).

Zu lösendes Eigenwert-Problem: $\left(\frac{\partial^2}{\partial t^2} - H\right)\psi = 0$, Ansatz $\psi(x, t) = e^{\pm i\omega t}\psi(x) \Rightarrow -\omega^2\psi(x) = H\psi(x)$

Ein möglichst einfaches Beispiel dazu:

$$\epsilon_r = 1 + \delta\epsilon \cos\left(\frac{2\pi}{L}x\right)$$

mit $\delta\epsilon \ll 1 \Rightarrow$

$$\begin{aligned} H &= -c^2 \text{rot} \frac{1}{1 + \delta\epsilon \cos\left(\frac{2\pi}{L}x\right)} \text{rot} \\ &\approx -c^2 \text{rot} \left(1 - \delta\epsilon \cos\left(\frac{2\pi}{L}x\right)\right) \text{rot} \\ &= H_0 + \delta\epsilon H_1 \end{aligned}$$

mit

$$\begin{aligned} H_0 &= -c^2 \text{rot} \text{rot} \\ H_1 &= c^2 \text{rot} \cos\left(\frac{2\pi}{L}x\right) \text{rot} \end{aligned}$$

Betrachte Lichtwelle entlang der x-Achse:

$$\mathbf{B}(\mathbf{x}) = B(x)\mathbf{e}_y$$

Dieser Ansatz erfüllt die Maxwell-Gleichung $\text{div } \mathbf{B} = 0$. Für die Wirkung des Hamilton-Operators folgt

$$\left(-\text{rot} \frac{1}{\epsilon_r(x)} \text{rot} \mathbf{B}\right) = \left(\frac{\partial}{\partial x} \frac{1}{\epsilon_r(x)} \frac{\partial}{\partial x} B\right) \mathbf{e}_y$$

Verwende nun Störungstheorie: $B(x) = \langle x|B\rangle$, $|B\rangle = |B_0\rangle + \delta\epsilon |B_1\rangle$, dabei ist $|B_0\rangle$ ein Impuls-eigenzustand p_0 .

$$(H_0 + \delta\epsilon H_1)(|B_0\rangle + \delta\epsilon |B_1\rangle) = -\omega^2(|B_0\rangle + \delta\epsilon |B_1\rangle) \text{ mit } \omega^2 = \omega_0^2 + \delta\epsilon \omega_1^2$$

²Eine andere Wahl kann durch Ändern des Summationsindex auf diese Wahl zurückgeführt werden. Falls z.B. $q' = q + 2\pi/L$ so erhält man dieselbe Entwicklung mit $\psi_{q,n}$ ersetzt durch $\psi_{q',n-1}$.

Gleichung 0. Ordnung:

$$\begin{aligned} H_0 |p_0\rangle &= -\omega_0^2 |p_0\rangle \\ &= -c^2 \frac{p_0^2}{\hbar^2} |p_0\rangle \end{aligned}$$

$$\Rightarrow \omega_0 = \left| \frac{cp_0}{\hbar} \right|$$

Gleichung 1. Ordnung:

$$H_0 |B_1\rangle + H_1 |B_0\rangle = -\omega_1^2 |B_0\rangle - \omega_0^2 |B_1\rangle$$

Dies zu lösen ist unübersichtlich. Von der Struktur sieht die Lösung wie folgt aus: Die Änderung des Eigenwertes kann aus $-\omega_1^2 = \langle B_0 | H_1 | B_0 \rangle$ bestimmt werden. Der Zustand hat die Struktur

$$\begin{aligned} |B_1\rangle &\sim H_1 |B_0\rangle \\ &\sim \text{rot} \cos\left(\frac{2\pi}{L}x\right) \text{rot} |p_0\rangle \\ &\sim \left(e^{i\frac{2\pi}{L}x} + e^{-i\frac{2\pi}{L}x}\right) |p_0\rangle \\ &\sim |p_0 + \underbrace{\frac{2\pi}{L}\hbar}_k\rangle + |p_0 - \frac{2\pi}{L}\hbar\rangle \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} H_0 |p\rangle &= -\frac{c^2 p^2}{\hbar^2} |p\rangle \\ &= \omega_0^2(p) |p\rangle \end{aligned}$$

Für $p_0 \approx \frac{\hbar k}{2}$ ist $c|p_0 - \hbar k|$ nahezu resonant zu $c|p_0|$, während $p_0 + \hbar k$ eine viel höhere ungestörte Energie hat $\Rightarrow H_1$ koppelt vornehmlich p_0 und $p_0 - \hbar k$ für $p_0 \approx \frac{\hbar k}{2}$ ³. Man erhält also effektiv ein Zwei-Niveau-System. Ist $|p_0|$ sehr verschieden von $\frac{\hbar k}{2}$, so ist die Kopplung vernachlässigbar. Ein Schema der daraus folgenden Energieniveaus ist in Abb. 10.2 dargestellt.

Betrachten wir das Zwei-Niveau-System für $p_0 \approx \frac{\hbar k}{2}$. Bezeichnen wir das Matrixelement $\langle p_0 | H_1 | p_0 - \hbar k \rangle$ mit h_1 , so erhält man die Gleichungen

$$|B\rangle \approx \alpha |p_0\rangle + \beta |p_0 - \hbar k\rangle$$

$$\delta\epsilon H_1 |p_0\rangle \approx \delta\epsilon h_1 |p_0 - \hbar k\rangle$$

$$\delta\epsilon H_1 |p_0 - \hbar k\rangle \approx \delta\epsilon h_1 |p_0\rangle$$

und das Eigenwert-Problem

$$H |B\rangle = -\omega^2 |B\rangle$$

³bzw. p_0 und $p_0 + \hbar k$ für $p_0 \approx -\frac{\hbar k}{2}$

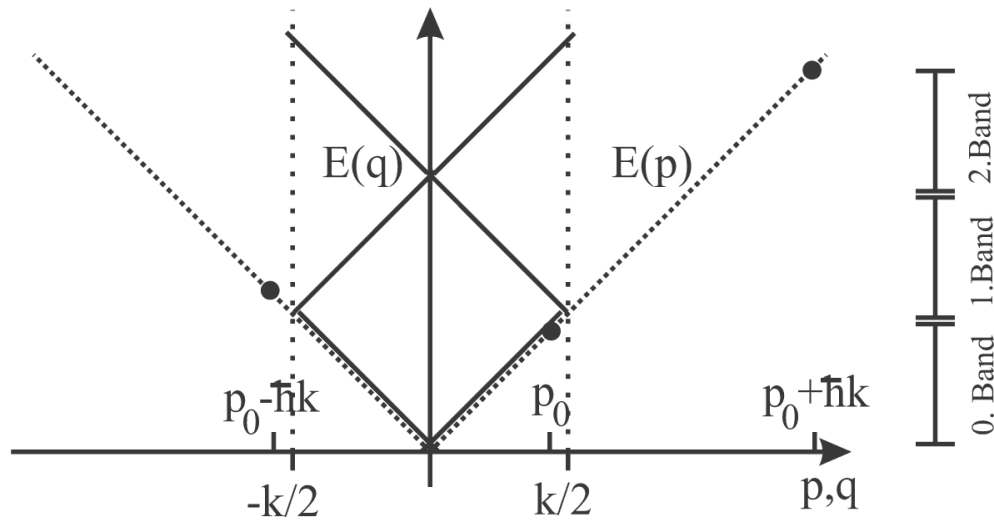


Abbildung 10.1: Energie-(Quasi-)Impulsrelation für elektromagnetische Wellen im freien Raum. Die gestrichelte Linie beschreibt die Energie $E(p) = c|p|$ in Abhängigkeit vom Impuls p , die durchgezogene in Abhängigkeit vom Quasi-Impuls q . Der Unterschied ist lediglich eine andere Benennung der Quantenzahlen: statt einer kontinuierlichen Variable p benutzt man eine kontinuierliche q und den diskreten Bandindex n .

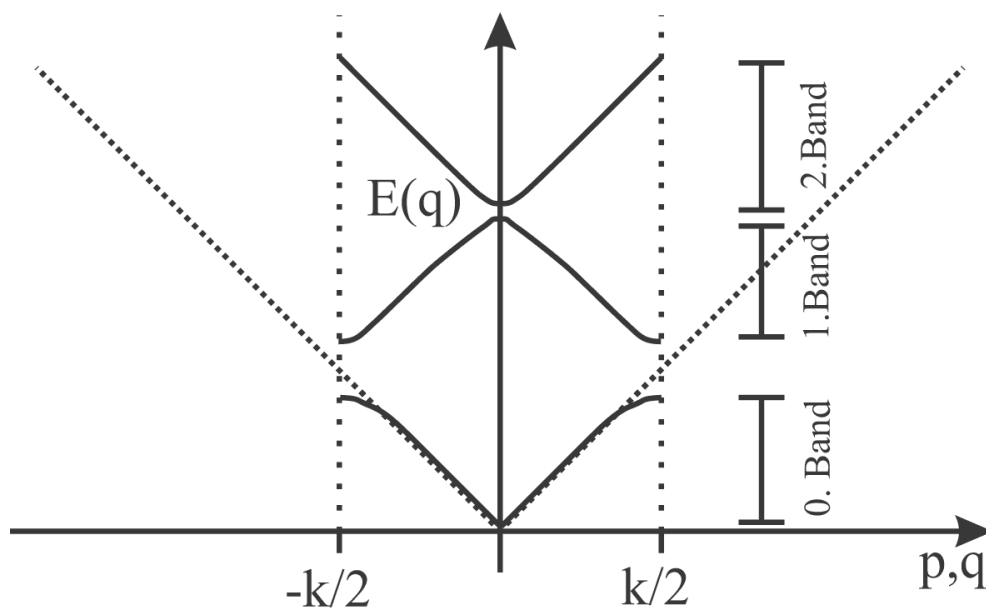


Abbildung 10.2: Energie-Quasiimpulsrelation für elektromagnetische Wellen im periodischen Dielektrikum. An den Stellen, an denen die freien Zustände resonant sind, entstehen Bandlücken.

$$H |B\rangle = \begin{pmatrix} -\omega_0^2(p_0) & \delta\epsilon h_1 \\ \delta\epsilon h_1^\dagger & -\omega_0^2(p_0 - \hbar k) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix}$$

mit den Eigenwerten:

$$-\frac{\omega_0^2(p_0) + \omega_0^2(p_0 - \hbar k)}{2} \pm \frac{1}{2} \sqrt{(\omega_0^2(p_0) - \omega_0^2(p_0 - \hbar k))^2 + 4\delta\epsilon^2}$$

wobei die "Verstimmung" gegeben ist durch $\omega_0^2(p_0) - \omega_0^2(p_0 - \hbar k) \sim 2\frac{c^2}{\hbar^2} k \Delta p$ worin der Anfangsimpuls gemäß $p_0 = \frac{\hbar k}{2} + \Delta p$ relativ zu $\hbar k/2$ angegeben ist. Δp spielt daher eine ähnliche Rolle wie die echte Verstimmung beim Zwei-Niveau-System aus Abschnitt 5.3. Variiert man Δp , so erhält man in völliger Analogie zum Landau-Zener-Übergang ein avoided crossing, welches dazu führt, dass Bandlücken entstehen.

Bedeutung der Photonic Band Gaps:

- Licht mit Frequenzen innerhalb einer Bandlücke kann nicht durch das Medium propagieren. Das kann benutzt werden für Spiegel, Glasfasern, Filter, ...
- Theoretische Vorhersage: Spontane Emission von Atomen, die in das Medium eingebettet sind, wird stark modifiziert [21]. Jedoch sind photonische Kristalle mit Bandlücken, die sich über den kompletten Winkelbereich des Photonenimpulses erstrecken, erst seit recht kurzer Zeit vorhanden [22].

Kapitel 11

Bose-Einstein-Kondensate

11.1 Vielteilchentheorie bosonischer Atome

In Kapitel 2 wurde die allgemeine Struktur von Vielteilchentheorien in der Quantenmechanik behandelt. Diese soll nun auf bosonische Atome angewendet werden:

Sei $H_0(x, p)$ ein Ein-Teilchen-Operator, z.B.

$$H_0(x, p) = \frac{p^2}{2M} + V(r)$$

mit Eigenzuständen $H_0\psi_n(x) = E_n\psi_n(x)$. Die Eigenzustände sollen normiert sein, $\langle\psi_n|\psi_m\rangle = \delta_{n,m} = \int d^3x \psi_n^*(x)\psi_m(x)$. Mit Hilfe dieser Basis kann man den Feldoperator

$$\hat{\Psi}(\mathbf{x}) = \sum_n \hat{a}_n \psi_n(\mathbf{x})$$

eingeführen, der ein Atom am Ort \mathbf{x} vernichtet. Der Feldoperator und die Erzeuger/Vernichter erfüllen die Kommutator-Relationen

$$[\hat{\Psi}(\mathbf{x}), \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{y})] = \delta(\mathbf{x} - \mathbf{y}) \quad , \quad [\hat{a}_n, \hat{a}_m^\dagger] = \delta_{n,m}$$

Freier Hamilton Operator mittels Feldoperatoren ausgedrückt:

$$\hat{H}_0 = \int d^3x \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{x}) H_0(\mathbf{x}, \mathbf{p}) \hat{\Psi}(\mathbf{x}) \quad (11.1)$$

wobei: $\mathbf{p} \rightarrow i\hbar\nabla$

Die Wechselwirkung wird über einen Mehrteilchenoperator vermittelt. Der eine Kollision vermittelnde Operator lautet

$$\hat{H}_{Coll} = \frac{1}{2} \int d^3x d^3y \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{x}) \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{y}) V(\mathbf{x} - \mathbf{y}) \hat{\Psi}(\mathbf{y}) \hat{\Psi}(\mathbf{x}) \quad (11.2)$$

Diese Darstellung des Operators im Fock-Raum ist eine Art „Matrixelement“ des Operators für zwei Teilchen. V kann zum Beispiel das Coulomb Potential darstellen. Allgemein tritt pro an der Wechselwirkung beteiligtem Teilchen ein Feldoperator und der entsprechende adjungierte Operator (am selben Ort genommen) im Wechselwirkungs-Hamiltonian auf. Diese Darstellung der Wechselwirkung hängt eng mit den Feynman Diagrammen zusammen.

Beispiel: Anwendung auf einen 2-Teilchen-Zustand

$$|\psi\rangle = \hat{a}_1^\dagger \hat{a}_2^\dagger |0\rangle \text{ d.h. 1 Teilchen in Mode 1} \quad (11.3)$$

1 Teilchen in Mode 2

Der Effekt der Wechselwirkung kann nun berechnet werden. In $|\psi\rangle$ sind die beiden Atome unkorreliert, die Wechselwirkung wird im allgemeinen eine Korrelation erzeugen. Also:

$$\hat{H}_{Coll} |\psi\rangle = \frac{1}{2} \int d^3x d^3y \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{x}) \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{y}) V(\mathbf{x} - \mathbf{y}) [\hat{\Psi}(\mathbf{y}) \hat{\Psi}(\mathbf{x}), \hat{a}_1^\dagger \hat{a}_2^\dagger] |0\rangle \quad (11.4)$$

dies gilt wegen

$$\hat{\Psi}(\mathbf{x}) |0\rangle = 0 \text{ und } [\hat{\Psi}(\mathbf{y}) \hat{\Psi}(\mathbf{x}), \hat{a}_1^\dagger \hat{a}_2^\dagger] |0\rangle = \left(\hat{\Psi}(\mathbf{y}) \hat{\Psi}(\mathbf{x}) \hat{a}_1^\dagger \hat{a}_2^\dagger - \hat{a}_1^\dagger \hat{a}_2^\dagger \hat{\Psi}(\mathbf{y}) \hat{\Psi}(\mathbf{x}) \right) |0\rangle \quad (11.5)$$

Es muß also noch der Kommutator in (11.5) berechnet werden. Man findet so unter Ausnutzung der Relation $[AB, C] = A[B, C] + [A, C]B$ nach längerer Rechnung:

$$[\hat{\Psi}(\mathbf{y}) \hat{\Psi}(\mathbf{x}), \hat{a}_1^\dagger \hat{a}_2^\dagger] |0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (\psi_1(\mathbf{y}) \psi_2(\mathbf{x}) + \psi_2(\mathbf{y}) \psi_1(\mathbf{x})) |0\rangle \quad (11.6)$$

wobei noch folgende nützliche Relation verwendet wurde:

$$\begin{aligned} [\hat{\Psi}(\mathbf{x}), \hat{a}_1^\dagger] &= \left[\sum_m \hat{a}_m \psi_m(\mathbf{x}), \hat{a}_1^\dagger \right] \\ &= \sum_m \psi_m(\mathbf{x}) \underbrace{[\hat{a}_m, \hat{a}_1^\dagger]}_{\delta_{1m}} = \psi_1(\mathbf{x}) \end{aligned} \quad (11.7)$$

Mit diesem Ergebnis erhält man für den Wechselwirkungshamiltonian:

$$\hat{H}_{Coll} |\Psi\rangle = \int d^3x d^3y \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{x}) \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{y}) V(\mathbf{x} - \mathbf{y}) (\psi_1(\mathbf{y}) \psi_2(\mathbf{x}) + \psi_1(\mathbf{x}) \psi_2(\mathbf{y})) |0\rangle \quad (11.8)$$

d. h. die Wirkung des Operators auf einen Zweiteilchenzustand erzeugt einen neuen Zweiteilchenzustand, der mit dem Wechselwirkungspotential gewichtet wird und so Korrelationen zwischen Teilchen am Ort \mathbf{x} und \mathbf{y} enthält.

Wechselwirkung mit Licht In diesem Fall hat der Wechselwirkungs-Hamiltonian die Form

$$-\hat{\mathbf{d}} \cdot \hat{\mathbf{E}}(\mathbf{x}) \rightarrow - \int d^3x \hat{\Psi}_e^\dagger(\mathbf{x}) \hat{\Psi}_g(\mathbf{x}) \mathbf{d}_{eg} \cdot \hat{\mathbf{E}}^{(+)}(\mathbf{x}) + h.c. \quad (11.9)$$

Wobei $\hat{\Psi}_g$ und $\hat{\Psi}_e$ jeweils Atome in Grund- und angeregtem Zustand vernichten. Insgesamt wird also ein Photon vernichtet und ein Grundzustandsatom durch ein angeregtes ersetzt. Auch dieser Operator hat die Struktur einer Art „Matrizelement“.

Bewegungsgleichungen Im Heisenbergbild lauten die Bewegungsgleichungen eines solchen Systems:

$$i\hbar\dot{\hat{\Psi}} = [\hat{\Psi}(\mathbf{x}), \hat{H}] \quad (11.10)$$

Für den freien Anteil des Hamiltonians lauten sie insbesondere:

$$\begin{aligned} [\hat{\Psi}(\mathbf{x}), H_0] &= \int d^3x' [\hat{\Psi}(\mathbf{x}), \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{x}') H_0(\mathbf{x}', \mathbf{p}') \hat{\Psi}(\mathbf{x}')] \\ &= \int d^3x' \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}') H_0(\mathbf{x}', \mathbf{p}') \hat{\Psi}(\mathbf{x}') \\ &= H_0(\mathbf{x}, \mathbf{p}) \hat{\Psi}(\mathbf{x}) \equiv \text{Schrödingergleichung} \end{aligned} \quad (11.11)$$

Wähle als $\psi_n(\mathbf{x})$ die Eigenfunktionen von $H_0(\mathbf{x}, \mathbf{p})$: $H_0(\mathbf{x}, \mathbf{p})\psi_n(\mathbf{x}) = E_n\psi_n(\mathbf{x})$:

$$H_0(\mathbf{x}, \mathbf{p})\hat{\Psi}(\mathbf{x}) = \sum_n H_0(\mathbf{x}, \mathbf{p})\hat{a}_n\psi_n(\mathbf{x}) = \sum_n \hat{a}_n E_n\psi_n(\mathbf{x}) \quad (11.12)$$

da H_0 nur auf $\psi_n(\mathbf{x})$ wirkt. Damit findet man die Bewegungsgleichung

$$i\hbar\dot{\hat{\Psi}}(\mathbf{x}) = i\hbar \sum_n \dot{\hat{a}}_n\psi_n(\mathbf{x}) = H_0(\mathbf{x}, \mathbf{p})\hat{\Psi}(\mathbf{x}) = \sum_n \hat{a}_n E_n\psi_n(\mathbf{x}) \quad (11.13)$$

$$\Rightarrow \hat{a}_n(t) = e^{-iE_n t/\hbar} \hat{a}_n(0) \text{ da die } \psi_n \text{ orthogonal sind.} \quad (11.14)$$

Insbesondere gilt auch:

$$\hat{H}_0 = \int d^3x \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{x}) H_0(\mathbf{x}, \mathbf{p}) \hat{\Psi}(\mathbf{x}) = \int d^3x \sum_n \hat{a}_n^\dagger \psi_n^*(\mathbf{x}) H_0(\mathbf{x}, \mathbf{p}) \sum_{n'} \hat{a}_{n'} \psi_{n'}(\mathbf{x}) \quad (11.15)$$

$$= \sum_{n, n'} \hat{a}_n^\dagger \hat{a}_{n'} \underbrace{\langle \psi_n | H_0(\mathbf{x}, \mathbf{p}) | \psi_{n'} \rangle}_{= E_n \delta_{nn'}}_{\text{1-Teilchen}} \quad (11.16)$$

$$= \sum_n \hat{a}_n^\dagger \hat{a}_n E_n \quad (11.17)$$

Also die bereits von den Photonen bekannte Form der Gesamtenergie.

11.2 Der Bose-Einstein-Phasenübergang

Anwendung des eben Gelernten auf den Bose-Einstein-Phasenübergang. Betrachte den Gleichgewichtszustand eines nicht wechselwirkenden Bose-Gases mit N Teilchen. Aus der statistischen Mechanik übernehmen wir die Form der Dichtematrix

$$\begin{aligned} \varrho &= \frac{1}{Z} e^{-\beta \hat{H}_0} = \frac{1}{Z} e^{-\beta \sum_n \hat{N}_n E_n} & \hat{N}_n &:= a_n^\dagger a_n \\ &= \frac{1}{Z} \prod_n e^{-\beta \hat{N}_n E_n} = \frac{1}{Z} \prod_n \sum_{N_n=0}^N e^{-\beta N_n E_n} |N_n\rangle \langle N_n| & \Leftrightarrow \text{Spektralzerlegung} \end{aligned} \quad (11.18)$$

mit: $Z := \text{Tr} e^{-\beta \hat{H}_0}$ und der Nebenbedingung $\sum_n N_n = N$.

In Lehrbüchern wird die folgende Rechnung im allgemeinen für die großkanonische Gesamtheit durchgeführt, da dort die kombinatorischen Schwierigkeiten, die aus der Nebenbedingung $\sum N_n = N$ entstehen, wegfallen.

Wir verwenden die kanonische Gesamtheit, da wir einen sehr einfachen Fall betrachten: Nur 2 Moden $\psi_0(\mathbf{x})$, $\psi_1(\mathbf{x})$ sind vorhanden.

$$\Rightarrow \varrho = \frac{1}{Z} \sum_{N_1=0}^N \underbrace{e^{-i\beta N_1 E_1}}_{1. \text{ Mode}} \underbrace{e^{-\beta(N-N_1)E_0}}_{\text{Nebenbdg.}} |(N-N_1)_0, N_1\rangle \langle (N-N_1)_0, N_1| \quad (11.19)$$

Setze $E_0 = 0$, $E_1 = \Delta E$.

$$\Rightarrow \varrho = \frac{1}{Z} \sum_{N_1=0}^N e^{-\beta N_1 \Delta E} |(N-N_1)_0, N_1\rangle \langle (N-N_1)_0, N_1| \quad (11.20)$$

Damit kann die Zustandssumme sehr einfach berechnet werden:

$$Z = \text{Tr} e^{-\beta \hat{H}_0} = \sum_{N_1=0}^N e^{-\beta N_1 \Delta E} \quad (11.21)$$

Setze $q := e^{-\beta \Delta E} < 1 \Rightarrow$

$$Z = \sum_{N_1=0}^N q^{N_1} = \frac{1 - q^{N+1}}{1 - q} \quad (11.22)$$

Berechne die mittlere Teilchenzahl in Mode 1 (angeregte Mode):

$$\begin{aligned} \bar{N}_1 &= \text{Tr}(\varrho \hat{N}_1) \\ &= \frac{1}{Z} \sum_{N_1=0}^N N_1 q^{N_1} \\ &= \frac{1-q}{1-q^{N+1}} \frac{q}{(1-q)^2} \{1 - (N+1)q^N + Nq^{N+1}\} \end{aligned}$$

Im Fall einer großen Anzahl von Atomen findet man

$$\lim_{N \rightarrow \infty} N q^N = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{N}{q^{-N}} = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{-\ln q q^{-N}} = \lim_{N \rightarrow \infty} \left(-\frac{1}{\ln q} \right) q^N = 0 \quad (11.23)$$

$$\Rightarrow \lim_{N \rightarrow \infty} \bar{N}_1 = \frac{q}{(1-q)} < \infty \quad (q < 1) \quad (11.24)$$

D. h. es tritt ein Sättigungseffekt auf. Ab einer gewissen Anzahl von Atomen gehen *alle* weiteren Atome, die man hinzufügt, in den Grundzustand. Für ein freies Gas befinden sich für $T \rightarrow 0$ alle

Atome im Grundzustand. In einem wechselwirkenden (realen) Gas verbleibt ein Rest angeregter Atome.

Addiert man also bei festgehaltener Temperatur Teilchen zu einem bosonischen Gas, so gehen ab einer gewissen Anzahl alle neuen Teilchen in den Grundzustand. Die Anzahl der angeregten Atome wird gesättigt.

Dieses Ergebnis ist unabhängig von der Anzahl der Moden (gilt auch für kontinuierliche Moden) und von der zu Grunde gelegten Gesamtheit (kanonisch, großkanonisch). Es existiert eine kritische Temperatur für die gilt:

$$\frac{\bar{N}_0}{N} = \frac{N - \bar{N}_1}{N} = 1 - \frac{q}{N(1-q)^3} \lesssim 1 \quad (11.25)$$

Für kleines $\beta\Delta E$ gilt nun $1 - q \approx \beta\Delta E$ (wegen $q = e^{-\beta\Delta E}$) also:

$$\frac{\bar{N}_0}{N} \approx \frac{1}{N(\beta\Delta E)} \approx 1 \quad (11.26)$$

Dies ist eine Bedingung an β , die angibt, wann sich eine makroskopische Anzahl von Atomen im Grundzustand befindet. Bis auf numerische Vorfaktoren stimmt dies mit dem Ergebnis für harmonische Fallen überein [24]. Im freien Raum erhält man andere Bedingungen, die meist mit Hilfe der thermischen deBroglie-Wellenlänge ausgedrückt werden:

$$\varrho \lambda_{dB}^3 = \zeta\left(\frac{3}{2}\right) \approx 2.612 \quad (11.27)$$

mit $\lambda_{dB} := \sqrt{2\pi\hbar^2/(Mk_B T)}$. Dies läßt sich folgendermaßen deuten: In einem thermischen Gas kann man sich vorstellen, daß die Teilchen Wellenpakete mit Ausdehnung λ_{dB} bilden. Die Bedingung (11.27) für die Bose-Einstein-Kondensation bedeutet, daß man in etwa ein Teilchen pro Volumen λ_{dB}^3 hat. Hat man weniger Teilchen, so überlappen die Wellenpakete sich nicht und merken nichts von ihrer bosonischen Natur. Überlappen sie, so kommt es zu Beeinflussungen und die Atome kondensieren.

11.3 Atome mit Wechselwirkung, kollektive Wellenfunktion

Wechselwirkung ist für ein BEC zwar nicht notwendig, muss aber in der Regel berücksichtigt werden. Dies kann man durch den Hamilton-Operator

$$\hat{H} = \int d^3x \hat{\Psi}^\dagger(x) H_0(x, p) \hat{\Psi}(x) + \frac{1}{2} \iint d^3x d^3y \hat{\Psi}^\dagger(x) \hat{\Psi}^\dagger(y) V(x-y) \hat{\Psi}(y) \hat{\Psi}(x) \quad (11.28)$$

ausdrücken. Atomare BECs (^{87}Ru , ^{23}Na , ...) sind verdünnte Gase in dem Sinn, dass der mittlere Abstand der Atome weit größer ist als die Streulänge a ihrer Wechselwirkung ¹

$$\varrho a^3 \ll 1 \quad (\varrho \hat{=} \text{Dichte}) \quad (11.29)$$

¹Die Streulänge a ist definiert über den Streuquerschnitt, $\sigma \propto a^2$. Für die üblichen atomaren BECs ist sie einige Nanometer groß.

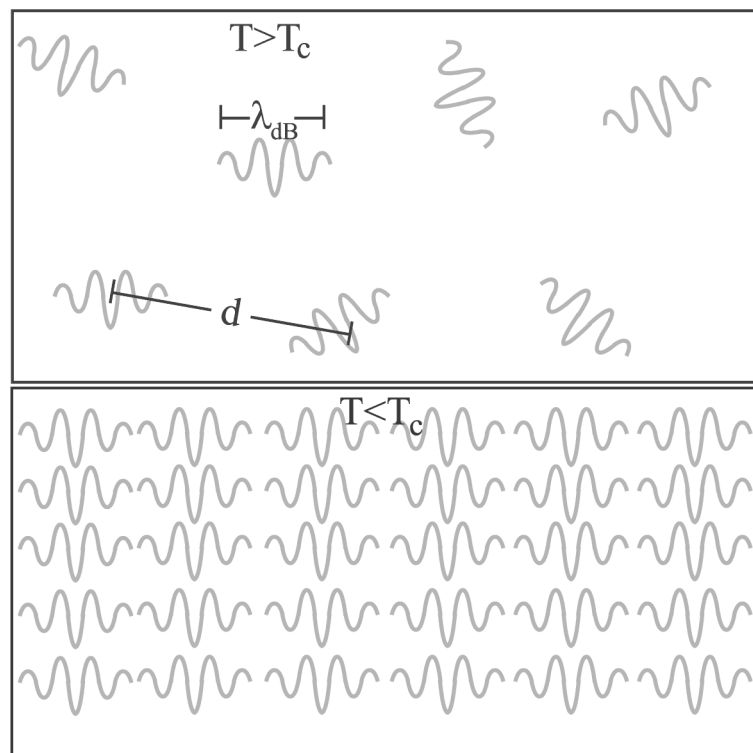


Abbildung 11.1: Anschauliche Interpretation der Bose-Einstein-Kondensation: für $T < T_c$ oder zu geringe Dichten $\varrho = d^{-3}$ sind die Wellenpakete zu weit auseinander und beeinflussen sich gegenseitig nicht. Ist die BEC-Bedingung erfüllt, so sind die Wellenpakete nahe genug beieinander, damit ihre bosonische Statistik wirken kann. Da Bosonen eine Tendenz haben, in denselben Zustand zu gehen, ist dann Kondensation möglich.

Die Potentiale sind kurzreichweitig ($\propto 1/r^6$, Van-der-Waals-Wechselwirkung), in diesem Fall kann man das Potential als punktförmig auf der Skala des mittleren Abstandes betrachten und $V(x - y)$ durch ein Kontaktpotential mit derselben Streulänge ersetzen

$$V(x - y) \longrightarrow \frac{4\pi\hbar^2 a}{M} \delta(x - y). \quad (11.30)$$

Der Vorfaktor ist hierbei gerade so gewählt, dass sich die richtige Streulänge für das Kontaktpotential ergibt. Dies ist ein so genanntes Pseudopotential². Der Hamiltonoperator lautet dann:

$$\hat{H} = \int d^3x \{ \hat{\Psi}^\dagger(x) H_0(x, p) \hat{\Psi}(x) + \frac{\kappa}{2} \hat{\Psi}^\dagger(x)^2 \hat{\Psi}(x)^2 \} \quad , \quad \kappa := \frac{4\pi\hbar^2 a}{M} \quad (11.31)$$

Den Grundzustand von \hat{H} findet man mit Hilfe eines Variationsansatzes. Dabei geht man von

$$|\psi\rangle = \frac{(a_0^\dagger)^N}{\sqrt{N!}} |0\rangle \quad (11.32)$$

(also N Atomen in der Mode ψ_0) als Zustand aus. Die Variationsvariable ist dabei die Mode $\psi_0(x)$, als Nebenbedingung muss gelten: $\int d^3x |\psi_0|^2 = 1$. Diese Nebenbedingung anders ausgedrückt bedeutet:

$$\langle \psi | \hat{N} | \psi \rangle = \langle \psi | \int d^3x \hat{\Psi}^\dagger(x) \hat{\Psi}(x) | \psi \rangle = N \quad (11.33)$$

Über die Kommutatorrelation

$$[\hat{\Psi}(x), (a_0^\dagger)^n] = N \psi_0(x) (a_0^\dagger)^{n-1} \quad (11.34)$$

kommt man durch längere Rechnung zu

$$\langle \psi | \hat{H} | \psi \rangle = N \int \{ \psi_0^* H_0 \psi_0 + \frac{\kappa}{2} (N-1) |\psi_0|^4 \} d^3x \quad (11.35)$$

$$\langle \psi | \hat{N} | \psi \rangle = N \int |\psi_0|^2 d^3x \quad (11.36)$$

Nun minimiert man $\langle \psi | \hat{H} | \psi \rangle - \mu (\langle \psi | \hat{N} | \psi \rangle - N)$ (Variation unter Nebenbedingung (11.33) nach $\psi_0(x)$). Man kann dies entweder durch normale Variationsrechnung („virtuelle Verrückung“) oder durch Funktionalableitung [23] erledigen.

$$\frac{\delta}{\delta \psi_0^*(x)} \left\{ \int \left[N \psi_0^* H_0 \psi_0 + \frac{\kappa}{2} N(N-1) (\psi_0^*)^2 \psi_0^2 - \mu N |\psi_0|^2 \right] d^3x + \mu N \right\} = 0 \quad (11.37)$$

²Genau genommen müsste man in 3D für das Pseudopotential $\partial_r(r\delta(r))$ benutzen (siehe z.B. [24]). Für sehr viele Situationen ist dies aber unerheblich.

Anwendung der „Funktionalableitung für Physiker“³

$$\frac{\delta}{\delta g(x)} F[g(x)] := \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{1}{\varepsilon} \{F[g(y) + \varepsilon \delta(x - y)] - F[g(y)]\} \quad (11.38)$$

führt zu

$$\mu \psi_0(x) = H_0 \psi_0(x) + \kappa(N - 1) |\psi_0|^2 \psi_0(x) \quad (11.39)$$

Dies ist die Gross-Pitevskii-Gleichung (GPE) oder nichtlineare Schrödinger-Gleichung (NLSE). ψ_0 heisst kollektive Wellenfunktion. Zwei Lösungen ψ_0, ψ'_0 können nicht mehr zu einer dritten superponiert werden, da die GPE nichtlinear ist. Die Dichte eines Kondensates ist $N|\psi_0|^2$, die kollektive Phase ist $\arg \psi_0$.

Die GPE kann auch aus der Heisenberg-Gleichung für den Feldoperator gewonnen werden:

$$\begin{aligned} i\hbar \hat{\Psi}(x, t) &= [\hat{\Psi}(x, t), \hat{H}] \\ &= H_0(x, p) \hat{\Psi}(x, t) + \kappa \hat{\Psi}^\dagger(x, t) \hat{\Psi}^2(x, t) \end{aligned} \quad (11.40)$$

Annahme: Das Kondensat ist im kohärenten Zustand $|\alpha\rangle$ der Mode ψ_0 . Dann kann $\hat{\Psi}$ durch $\alpha \psi_0(x)$ ersetzt werden ($|\alpha|^2 = N$). Man erhält also die GPE (11.39) zurück. In diesem Fall ist $\psi_0(x)$ völlig analog zu einer Lasermode des Lichtfeldes.

Es lässt sich bisher nicht entscheiden, ob ein BEC durch $|\alpha\rangle$ oder $\frac{(a_0^\dagger)^N}{\sqrt{N!}}$ besser beschrieben wird. Wahrscheinlichste Lösung: ein BEC entspricht einem Gemisch von Fock-Zuständen. Ein solches kann auch einem Gemisch kohärenter Zustände entsprechen, siehe Übungen.

11.4 Einfache Anwendungen der Gross-Pitaevskii-Gleichung

11.4.1 BECs in harmonischen Fallen , Thomas-Fermi-Näherung

Löse

$$\mu \psi = \frac{p^2}{2M} \psi + V \psi + N \kappa |\psi|^2 \psi \quad (11.41)$$

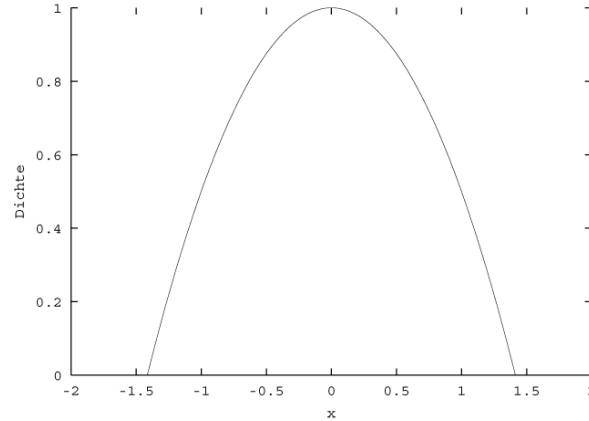
Annahme: nichtlinearer Term $N \kappa |\psi|^2 \psi$ ist viel größer als die kinetische Energie (klappt ab etwa 10 000 Atomen), also vernachlässige $\frac{p^2}{2M}$. Dies ist die Thomas-Fermi-Näherung. Es ergibt sich durch einfaches Auflösen:

$$N |\psi|^2 = \varrho = \frac{\mu - V}{\kappa} \quad (\varrho > 0) \quad (11.42)$$

Das chemische Potential μ wird durch die Normierung $\int |\psi_0|^2 d^3x = 1$ festgelegt.

In einem harmonischen Potential ergibt sich ein qualitativer Verlauf von ϱ wie in Abb. 11.2 gezeigt. Diese Dichteverteilung wurde auch bei den ersten Experimenten zu atomaren Kondensaten als Signatur für deren Entstehung verwendet [25, 26].

³In der Mathematik wird die Funktionalableitung etwas anders definiert. Im wesentlichen besteht der Unterschied darin, dass die Physiker-Funktionalableitung in etwa dem Integralkern der Mathematiker-Funktionalableitung entspricht und wie üblich etwas unsauberer definiert ist. Das einzige Buch, das sich meines Wissens mit dem Zusammenhang beschäftigt, ist das von Grossmann (Funktionalanalysis 1+2).

Abbildung 11.2: Plot von ϱ in harmonische Falle, beliebige Einheiten

Die Näherung bricht nur im Bereich niedriger Dichten, also hier am Rand des Kondensats, zusammen.

11.4.2 Solitonen

Solitonen sind Wellenpakete, die sich durch nichtlineare Effekte selbst stabilisieren und ihre Form nicht verändern. Die normale Dispersion eines Schrödinger-Wellenpaketes wird durch die Wechselwirkung zwischen den Atomen aufgehoben.

- **Bright-Solitons** , 1D: $V(x) = 0$, $\kappa < 0$, also attraktive Wechselwirkung. Es ergibt sich als DGL und als (eine) Soliton-Lösung

$$i\hbar\dot{\psi} = -\frac{\hbar^2}{2M}\psi'' - N|\kappa||\psi|^2\psi \quad (11.43)$$

$$\psi = e^{-i\mu t} \frac{1}{\cosh\left(\frac{x}{w}\right)} \frac{1}{\sqrt{2w}} \quad (11.44)$$

mit $w = 2\hbar^2/(|M||\kappa|)$ und $\mu = \hbar/(2M|w|^2)$. Bei dieser Lösung heben sich die kinetische Energie und Wechselwirkungs-Energie gerade auf, so dass das Wellenpaket auch ohne Fallen-Potential seine Form beibehält.

- **Dark-Solitons** , 1D: $V(x) = 0$, $\kappa > 0$, also repulsive Wechselwirkung. Die Lösung der DGL ist dann:

$$\psi = \frac{1}{\sqrt{2w}} e^{-i\mu t} \tanh\left(\frac{x}{w}\right) \quad (11.45)$$

Betrachtet man die Dichte $|\psi|^2$ so entspricht dies einem "Loch" in der ansonsten konstanten Dichte, sozusagen die Umkehrung der Bright-Solitons.

- **Gap-Solitons** sind Bright-Solitons für sich abstoßende ($\kappa > 0$) Atome. In diesem Fall ist die nichtlineare Energie positiv. Die Idee ist, dass man zur Kompensation die kinetische Energie mit Hilfe von Bandlücken negativ macht. Im periodischen Potential hat die freie Energie freier Teilchen eine Bandstruktur.

An der oberen Bandkante gilt: $E_0(q) \approx E_0 - \frac{\hbar}{2|M^*|} (q - \frac{k}{2})^2$. $M^* < 0$ heißt effektive Masse (= inverse der Krümmung von $E_0(q)$)

Entwickelt man ψ nach Bloch-Funktionen um die obere Bandkante herum, so kann man $\frac{p^2}{2M} + V(x)$ durch $E_0(q)$ ersetzen und erhält eine effektive negative kinetische Energie, die sich gegen die positive nichtlineare Energie aufheben kann.

Kapitel 12

Einschübe

12.1 Greenfunktion

Gegeben sei eine lineare inhomogene DGL der Form:

$$(\hat{L}_x F)(\mathbf{x}) = h(\mathbf{x})$$

Eine Greenfunktion ist eine spezielle Lösung mit der Inhomogenität $\delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}')$.

$$(\hat{L}_x G)(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}')$$

Kennt man $G(\mathbf{x}, \mathbf{x}')$, so ist die Lösung des inhomogenen DGL's gegeben durch:

$$F(\mathbf{x}) = \int G(\mathbf{x}, \mathbf{x}') \cdot h(\mathbf{x}') d\mathbf{x}' \quad (12.1)$$

Beweis:

$$\begin{aligned} (\hat{L}_x F)(x) &= \hat{L}_x \int dx' G(x, x') \cdot h(x) \\ &= \int dx' \hat{L}_x G(x, x') \cdot h(x) \\ &= \int dx' \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}') h(x) = h(x) \end{aligned}$$

12.2 Addition von Drehimpulsen

Ein Drehimpuls ist definiert als ein Vektor \mathbf{L} dessen drei Komponenten Operatoren mit den Kommutator-Relationen

$$[\mathbf{L}_a, \mathbf{L}_b] = i\hbar \varepsilon_{abc} \mathbf{L}_c . \quad (12.2)$$

Es lässt sich leicht zeigen, dass $[\mathbf{L}^2, \mathbf{L}_i] = 0$ ist, so dass man Eigenfunktionen von \mathbf{L}^2 und einer Komponente, meist wird L_z gewählt, findet:

$$\mathbf{L}^2 |l, m\rangle = \hbar^2 l(l+1) |l, m\rangle , \quad \mathbf{L}_z |l, m\rangle = \hbar m |l, m\rangle \quad (12.3)$$

Es ist ausserdem von Vorteil, die Operatoren $\mathbf{L}_\pm := \mathbf{L}_x \pm i\mathbf{L}_y$ einzuführen, die $[\mathbf{L}_\pm, \mathbf{L}_z] = \mp \hbar \mathbf{L}_\pm$ und $[\mathbf{L}_+, \mathbf{L}_-] = 2\hbar \mathbf{L}_z$ erfüllen. Es folgt

$$\begin{aligned} \mp \hbar \mathbf{L}_\pm |l, m\rangle &= [\mathbf{L}_\pm, \mathbf{L}_z] |l, m\rangle \\ &= m\hbar \mathbf{L}_\pm |l, m\rangle - \mathbf{L}_z \mathbf{L}_\pm |l, m\rangle \end{aligned} \quad (12.4)$$

so dass $\mathbf{L}_\pm |l, m\rangle$ proportional zu $|l, m \pm 1\rangle$ ist. Da $\mathbf{L}_+^\dagger = \mathbf{L}_-$ und $\mathbf{L}^2 = \mathbf{L}_z^2 + \mathbf{L}_+ \mathbf{L}_- - \hbar \mathbf{L}_z$ gilt, finden wir

$$\begin{aligned} \langle l, m | \mathbf{L}^2 | l, m \rangle &= \hbar^2 l(l+1) \\ &= \langle l, m | \mathbf{L}_z^2 + \mathbf{L}_+ \mathbf{L}_- - \hbar \mathbf{L}_z | l, m \rangle \\ &= \hbar^2 m^2 - \hbar^2 m + |\langle l, m | \mathbf{L}_+ | l, m-1 \rangle|^2 \end{aligned} \quad (12.5)$$

und somit

$$\langle l, m | \mathbf{L}_+ | l, m-1 \rangle = \langle l, m-1 | \mathbf{L}_- | l, m \rangle = \hbar \sqrt{l(l+1) - m(m+1)} \quad (12.6)$$

(Die Phasen der Zustände $|l, m\rangle$ lassen sich so wählen, dass diese Matrixelemente reell sind.)

Will man zwei (miteinander kommutierende) Drehimpulse \mathbf{L} und \mathbf{S} zu $\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S}$ addieren, so stellt sich die Frage, welche Eigenfunktionen geeignet sind. Eine mögliche Wahl ist das Tensorprodukt der Einzelbasen,

$$|l, m_l; s, m_s\rangle := |l, m_l\rangle \otimes |s, m_s\rangle. \quad (12.7)$$

Oft ist es jedoch bequemer, in der Eigenbasis von \mathbf{J}^2 und \mathbf{J}_z zu arbeiten. Wegen $[\mathbf{L}^2, \mathbf{J}_i] = [\mathbf{S}^2, \mathbf{J}_i] = 0$ ist diese durch vier Quantenzahlen

$$|j, m_j, (l, s)\rangle \quad (12.8)$$

charakterisiert. Die Matrixelemente $\langle l, m_l; s, m_s | j, m_j, (l, s) \rangle$ werden *Clebsch-Gordan-Koeffizienten* genannt und erlauben den Basiswechsel gemäß

$$|j, m_j, (l, s)\rangle = \sum_{m_l, m_s} \langle l, m_l; s, m_s | j, m_j, (l, s) \rangle |l, m_l; s, m_s\rangle \quad (12.9)$$

Wir kürzen sie im Folgenden mit C_{m_j, m_l, m_s} ab. Durch Anwenden von \mathbf{J}_z sieht man leicht, dass $m_s + m_l = m_j$ gelten muß. Die numerischen Werte für die Clebsch-Gordan-Koeffizienten lassen sich aus dem linearen Gleichungssystem

$$\begin{aligned} \langle l, m_l; s, m_s | \mathbf{J}_\pm | j, m_j, (l, s) \rangle &= C_{m_j \pm 1, m_l, m_s} \langle j, m_j \pm 1, (l, s) | \mathbf{J}_\pm | j, m_j, (l, s) \rangle \quad (12.10) \\ &= \langle l, m_l; s, m_s | (\mathbf{L}_\pm + \mathbf{S}_\pm) \sum_{m'_l, m'_s} C_{m_j, m'_l, m'_s} |l, m'_l; s, m'_s\rangle \\ &= \sum_{m'_l, m'_s} C_{m_j, m'_l, m'_s} \langle l, m_l; s, m_s | \mathbf{L}_\pm + \mathbf{S}_\pm | l, m'_l; s, m'_s \rangle \\ &= \sum_{m'_l, m'_s} C_{m_j, m'_l, m'_s} (\langle l, m_l | \mathbf{L}_\pm | l, m'_l \rangle \delta_{m_s, m'_s} + \\ &= \langle s, m_s | \mathbf{S}_\pm | s, m'_s \rangle \delta_{m_l, m'_l}) \\ &= C_{m_j, m_l \mp 1, m_s} \langle l, m_l | \mathbf{L}_\pm | l, m_l \mp 1 \rangle + \\ &= C_{m_j, m_l, m_s \mp 1} \langle s, m_s | \mathbf{S}_\pm | s, m_s \mp 1 \rangle \end{aligned}$$

und der Normierungsbedingung

$$\begin{aligned} 1 &= \langle j, m_j, (l, s) | j, m_j, (l, s) \rangle \\ &= \sum_{m_l, m_s} |\langle l, m_l; s, m_s | j, m_j, (l, s) \rangle|^2 \end{aligned} \quad (12.11)$$

ableiten. Setzt man die Matrixelemente der Drehimpulsoperatoren ein, so kann man das Gleichungssystem (12.11) in die Form

$$\begin{aligned} C_{m_j \pm 1, m_l, m_s} \sqrt{j(j+1) - (m_j+1)(m_j+1 \pm 1)} &= \\ C_{m_j, m_l \mp 1, m_s} \sqrt{l(l+1) - (m_l+1)(m_l+1 \mp 1)} + \\ C_{m_j, m_l, m_s \mp 1} \sqrt{s(s+1) - (m_s+1)(m_s+1 \mp 1)} \end{aligned} \quad (12.12)$$

bringen. Allgemein sind die Clebsch-Gordan-Koeffizienten nur von Null verschieden, wenn $l + s \geq j \geq |l - s|$ erfüllt ist.

Bei der Addition von drei oder mehr Drehimpulsen muß man bei der Wahl der Basis vorsichtig sein. Betrachte den Fall $\mathbf{F} = \mathbf{I} + \mathbf{L} + \mathbf{S}$. Addieren wir zunächst $\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S}$ und dann $\mathbf{F} = \mathbf{I} + \mathbf{J}$, so würde die obige Prozedur uns die Basis $\{|f, m_f, (i, j)\rangle\}$ liefern, also Eigenzustände von \mathbf{F}^2 , \mathbf{F}_z , \mathbf{I}^2 und \mathbf{J}^2 . Addieren wir aber zunächst $\mathbf{\Sigma} = \mathbf{I} + \mathbf{S}$ und dann $\mathbf{F} = \mathbf{L} + \mathbf{\Sigma}$, so benutzen wir die Basis $\{|f, m_f, (l, \sigma)\rangle\}$. Die beiden Basen sind verschieden, in diesem Sinne ist die Addition von Drehimpulsen sozusagen nicht assoziativ. Welche der Basen besser geeignet ist, hängt von der physikalischen Situation ab.

Gute Abhandlungen über Drehimpulse in der Quantenmechanik finden sich in [2] und [3].

12.2.1 Weitere Darstellung der Addition von Drehimpulsen

$$\begin{aligned} [L_i, L_j] &= i\hbar \epsilon_{ijk} L_k \\ [\mathbf{L}^2, L_i] &= 0 \\ L_z |lm\rangle &= \hbar m |lm\rangle \\ \mathbf{L}^2 |lm\rangle &= \hbar^2 l(l+1) |lm\rangle \end{aligned} \quad (12.13)$$

Der Gesamtdrehimpuls ist $\mathbf{j} = \mathbf{L} + \mathbf{S}$.

$$|\psi\rangle = \sum_{l, m} \sum_{s, m_s} \psi_{lm s m_s} |l, m\rangle \otimes |s, m_s\rangle \quad (12.14)$$

Dabei ist $|\psi\rangle \in$ Produktraum, die $|l, m\rangle \otimes |s, m_s\rangle$ sind Eigenfunktionen von $L_z, \mathbf{L}^2, S_z, \mathbf{S}^2$. Die Problemstellung ist nun, eine Basis des Produktraumes zu finden, die \mathbf{j}^2 und j_z diagonalisiert.

$$\begin{aligned} \mathbf{j}^2 |\psi\rangle &= \hbar^2 j(j+1) |\psi\rangle \\ j_z |\psi\rangle &= \hbar m_j |\psi\rangle \end{aligned} \quad (12.15)$$

$$\begin{aligned}
|\psi\rangle &= |j, m_j, l, s\rangle \\
j_z |\psi\rangle &= (L_z + S_z) |\psi\rangle \\
&= \sum_{lmsm_s} \psi_{lmsm_s} (\hbar m + \hbar m_s) |lm\rangle \otimes |sm\rangle \\
&\stackrel{!}{=} \hbar m_j \sum_{lmsm_s} \psi_{l,m,s,m_s} |lm\rangle \otimes |sm\rangle
\end{aligned} \tag{12.16}$$

$\Rightarrow |\psi\rangle$ kann nur gebildet werden durch Zustände, bei denen gilt: $m_j = m + m_s$.

$$\begin{aligned}
\mathbf{j}^2 &= (\mathbf{L} + \mathbf{S})^2 \\
&= \mathbf{L}^2 + \mathbf{S}^2 + 2\mathbf{LS} \\
\mathbf{LS} &= L_x S_x + L_y S_y + L_z S_z
\end{aligned} \tag{12.17}$$

Führe ein:

$$\begin{aligned}
L_{\pm} &= L_x \pm iL_y \\
S_{\pm} &= S_x \pm iS_y \\
L_- S_+ + L_+ S_- &= (L_x + iL_y)(S_x - iS_y) + (L_x - iL_y)(S_x + iS_y) \\
&= 2L_x S_x + 2L_y S_y + i(L_y S_x - L_x S_y) + i(L_x S_y - L_y S_x) \\
&= 2(L_x S_x + L_y S_y)
\end{aligned} \tag{12.18}$$

$$\Rightarrow \mathbf{LS} = L_z S_z + \frac{1}{2}(L_- S_+ + L_+ S_-) \tag{12.19}$$

$$\begin{aligned}
[L_{\pm}, L_z] &= [L_x \pm iL_y, L_z] \\
&= (-iL_y \pm iL_x) \\
&= \mp L_{\pm} \hbar \\
\Rightarrow L_z L_{\pm} |l, m\rangle &= (L_{\pm} L_z + [L_z, L_{\pm}]) |l, m\rangle \\
&= m\hbar L_{\pm} |l, m\rangle + \pm L_{\pm} |l, m\rangle \\
&= \hbar(m \pm 1) L_{\pm} |l, m\rangle \\
\Rightarrow L_{\pm} |l, m\rangle &\sim |l, m \pm 1\rangle
\end{aligned} \tag{12.20}$$

$$\begin{aligned}
[\mathbf{L}^2, \mathbf{L}_{\pm}] &= 0 \\
\Rightarrow |j, m_j, l, s\rangle &= \sum_{m, m_s: m+m_s=m_j} \psi_{m,l,m_j-m,s} |l, m\rangle |s, m_j - m\rangle
\end{aligned} \tag{12.21}$$

\Rightarrow Basis: $|j, m_j, l, s\rangle$

$$\begin{aligned}
\mathbf{F} &= \mathbf{S}' + \mathbf{j} \quad \Rightarrow |F, m_F, j, s'\rangle \\
\tilde{\mathbf{F}} &= (\mathbf{S}' + \mathbf{S}) + \mathbf{L} \quad \Rightarrow |\tilde{F}, m_{\tilde{F}}, S_G, L\rangle
\end{aligned} \tag{12.22}$$

12.3 Distributionen

Distributionen sind Objekte, die eigentlich nur unter einem Integral definiert sind. So ist z.B. $\delta(x - x_0)$ nur durch seine Wirkung unter dem Integral definiert:

$$\int dx f(x) \delta(x - x_0) := f(x_0)$$

wobei $f(x)$ eine sog. Test-Funktion sein soll. Grob gesagt sind Testfunktionen Funktionen, die sich immer gutartig verhalten. Etwas formaler sind es C^∞ -Funktionen mit begrenztem Träger, oder sie fallen zumindest hinreichend schnell ab für $|x| \rightarrow \infty$). Distributionen sind keine Funktionen. $\delta(x - x_0)$ ist z.B. nicht am Ort x_0 definiert.

Das Integral $D(\omega) := \int_0^\infty d\tau e^{-i\omega\tau}$ ist auch im Distributions-Sinn zu verstehen:

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega D(\omega) f(\omega) &= \int_{-\infty}^{\infty} d\omega f(\omega) \int_0^\infty d\tau e^{-i\omega\tau} \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} d\omega f(\omega) \left(\pi \delta(\omega) - i \frac{P}{\omega} \right) \\ &= \pi f(0) - i \lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} \left(\int_{-\infty}^{-\epsilon} \frac{d\omega}{\omega} f(\omega) + \int_{\epsilon}^{\infty} \frac{d\omega}{\omega} f(\omega) \right) \end{aligned}$$

Der Schritt von der ersten zur zweiten Zeile kann mathematisch bewiesen werden. Der darin auftretende Hauptwert bedeutet, dass auf beiden Seiten der Singularität dasselbe ϵ verwendet wird. Im Unterschied dazu muß man beim normalen Grenzwert für beide Seiten der Singularität verschiedene Grenzwerte verwenden.

Literaturverzeichnis

- [1] J.D. Jackson, *Classical Electrodynamics*, Wiley 1999.
- [2] J.J. Sakurai, *Modern Quantum Mechanics*, Addison Wesley, 1994.
- [3] D.M. Brink and G.R. Satchler, *Angular Momentum*, Oxford Library of Physical Sciences 1968.
- [4] R. F. Streater and A. S. Wightman, *PCT, spin and statistics, and all that* (1964) Beautiful text on the axiomatic formulation of QFT, i.e., the derivation of the properties of any QFT from a few basic axioms (such as Einstein locality). Mathematically superb, although some conclusions of this theory are discouraging. It nevertheless provides rigorous proofs of the spin-statistics theorem (i.e, that Bosons must have integer spin) and the PCT theorem (any QFT must be invariant under a space inversion followed by charge conjugation and time reversal).
- [5] D.F. Walls und G. Milburn, *Quantum Optics*, Springer, Berlin (1995).
- [6] P. Meystre und M. Sargent, *Elements of Quantum Optics*, 3. Auflage, Springer, Berlin (1999).
- [7] P.W. Milonni, *The quantum vacuum : an introduction to quantum electrodynamics* (1994). A very interesting book which mostly deals with the effect of boundaries (Casimir effect) and some particular quantum field theoretical effects in (mostly non-relativistic) QED.
- [8] J.D.Bjorken und S.D.Drell *Relativistische Quantenfeldtheorie*, BI-Hochschultaschenbücher 101, Mannheim (1967).
- [9] E.R. Pike und S. Sarkar, *The quantum theory of radiation*, Clarendon Press, Oxford (1995).
- [10] C. Cohen-Tannoudji, J. Dupont-Roc und G. Grynberg, *Atom-photon interactions : basic processes and applications* (1992). A very good book dealing with the fundamental techniques to describe the interaction of atoms with light. Includes dressed states, resolvent method, master equations.
- [11] C. Cohen-Tannoudji, *Atomic motion in laser light*, in *Fundamental systems in quantum optics*, edited by J. Dalibard, J.M. Raimond and J. Zinn-Justin, Les Houches Session LIII, Elsevier Science Publishers 1992.

- [12] J. Dalibard and C. Cohen-Tannoudji, *Atomic motion in laser light: connection between semiclassical and quantum descriptions*, J. Phys. B **18**, 1661 (1985).
- [13] S.-Y. Zhu and M.O. Scully, *Spectral Line Elimination and Spontaneous Emission Cancellation via Quantum Interference*, Phys. Rev. Lett. **76**, 388 (1996).
- [14] H.-R. Xia, C.-Y. Ye, and S.-Y. Zhu, *Experimental observation of spontaneous emission cancellation*, Phys. Rev. Lett. **77**, 1032 (1996).
- [15] Li Li, X. Wang, J. Yang, G. Lazarov, J. Qi, and A. M. Lyyra, *Comment on "Experimental Observation of Spontaneous Emission Cancellation"*, Phys. Rev. Lett. **84**, 4016 (2000).
- [16] M. Abramowitz and I.A. Stegun (Eds.), *Handbook of mathematical functions*, Dover, New York 1972.
- [17] A. Galindo and P. Pascual, *Quantum mechanics*, Springer, Heidelberg (1990).
- [18] M. Redhead, *Incompleteness, nonlocality and realism : a prolegomenon to the philosophy of quantum mechanics*, Oxford: Clarendon Pr., 1987.
- [19] A. Aspect, E. Arimondo, R. Kaiser, N. Vansteenkiste, and C. Cohen-Tannoudji, *Laser cooling below the one photon recoil energy by velocity-selective coherent population trapping: theoretical analysis*, Journ. Opt. Soc. Am. B **6**, 2112 (1989).
- [20] L.V. Hau., SE Harris, Z. Dutton, and C.H. Behroozi, *Light speed reduction to 17 metres per second in an ultracold atomic gas*, Nature **397**, 594-598 (1999).
- [21] S. John and T. Quang, *Spontaneous emission near the edge of a photonic band gap*, Phys. Rev. A **50**, 1764 (1994).
- [22] A. Blanco *et al.*, Nature **405**, 437 (2000).
- [23] S. Grossmann, *Funktionalanalysis*, Frankfurt a.M.: Akad.Verl.ges., 1970.
- [24] Y. Castin, *Bose-Einstein condensates in atomic gases: simple theoretical results*, <http://xxx.uni-augsburg.de, cond-mat/0105058>.
- [25] M. Anderson, J. R. Ensher, M. R. Matthews, C. E. Wieman, and E. A. Cornell, Science **269**, 198 (1995).
- [26] M.-O. Mewes, M. R. Andrews, N. J. van Druten, D. M. Kurn, D. S. Durfee, C. G. Townsend and W. Ketterle, Phys. Rev. Lett. **77**, 416 (1996).
- [27] E.A. Power and S. Zienau, *Coulomb gauge in nonrelativistic quantum electrodynamics and the shape of spectral lines*, Phil. Trans. A **251**, 427 (1959).
- [28] R.G. Woolley, *A reformulation of molecular quantum electrodynamics*, Journ. Phys. B **7**, 488 (1974).

- [29] Claude Cohen-Tannoudji, Jacques Dupont-Roc, and Gilbert Grynberg, *Photons and atoms : introduction to quantum electrodynamics* (1989). In this book the fundamental equations of non-relativistic QED are thoroughly explained.
- [30] D.P. Craig and T. Thirunamachandran, *Molecular quantum electrodynamics : an introduction to radiation-molecule interactions* (1997). Despite its title it is also very useful for atoms. A cheap (15 Euro) alternative to the first book.
- [31] M.O. Scully and M.S. Zubairy, *Quantum Optics* (1997). A very nice introduction which also covers electromagnetically induced transparency.
- [32] Leonard Mandel and Emil Wolf, *Optical coherence and quantum optics* (1995). One of the most comprehensive and complete texts on quantum optics. Gives a good survey of most techniques and topics.
- [33] D.F. Phillips, A. Fleischhauer, A. Mair, R. L. Walsworth, M. D. Lukin, *Storage of Light in Atomic Vapor*, Phys. Rev. Lett. **86**, 783 (2001).
- [34] C. Liu, Z. Dutton, C.H. Behroozzi, and L.V. Hau, *Observation of coherent optical information storage in an atomic medium using halted light pulses*, Nature **409**, 490 (2001).
- [35] F. Riehle, T. Kisters, A. Witte, J. Helmcke und C.J. Bordé, *Optical Ramsey spectroscopy in a rotating frame: Sagnac effect in a matter-wave interferometer*, Phys. Rev. Lett. **67**, 177 (1991).
- [36] C.J. Bordé, *Atomic interferometry with internal state labeling*, Phys. Lett. A **140**, 10 (1989).
- [37] M. Kasevich und S. Chu, *Atomic Interferometry using stimulated Raman Transitions*, Phys. Rev. Lett. **67**, 181 (1991).
- [38] O. Carnal und J. Mlynek, *Young's Double Slit Experiment with Atoms: A Simple Atom Interferometer*, Phys. Rev. Lett. **66**, 2689 (1991).

Index

- adiabatische Näherung, 125
- Anzahloperator, 23
- Atom-Interferometrie, 91
- avoided crossing, 76, 142

- Bahndrehimpulsoperator, 41
- Baker-Campbell-Hausdorf-Gleichung, 34
- Berry-Phase, 87
- Besselfunktionen
 - sphärische, 6
- Bewegungsgleichung
 - Vielteilchensystem, 145
- Bloch
 - Kugel, 71
 - Vektor, 71
- Born-Oppenheimer Näherung, 125
- Bose-Einstein
 - Übergang, 145
 - Kondensat, 143
- Bose-Gas, 145
- Brechungsindex, 134
 - Definition, 132

- Casimir-Effekt, 32
- Coulomb-Eichung, 5

- d'Alembert-Operator, 3
- Dark States, 79
- deBroglie-Wellenlänge, 147
- Dichtematrix, 100
 - Eigenschaften, 100
 - Kohärenzen, 102
- dielektrische Verschiebungsdichte, 11
- Dielektrizitätskonstante
 - relative, 137
- Differentialgleichungen
 - nichtlineare, 3
- Dipol, 7
- Dipolmoment, 7
- Direktes Produkt von Hilbert-Räumen, 105
- Distributionen, 157
- Divergenz, 1
- Doppler
 - Effekt, 124
 - Kühlung, 123
 - Verschiebung, 91
- Dressed States, 75
 - in einer Cavity, 76
- Dunkelzustand, 79, 87, 133

- Eichtransformationen, 5
- Einsteinsche Summenkonvention, 1
- EIT, 129, 133
- Elektromagnetisch induzierte Transparenz, 133
- Eliminierung
 - adiabatische, 94
- Entropie, 103
 - reiner Zustand, 104
- Erzeuger, 22

- Falle
 - harmonische, 150
- Feinstruktur, 42, 64
- Feldoperator, 23, 24
- Feynman-Diagramm, 143
- Fockraum, 21
- Fundamentalkräfte, 47

- Güte
 - Cavity-, 78
- Gaußscher Satz, 2
- Gesamtheit

- großkanonische, 146
 - kanonische, 146
- Green-Funktion, 6
- Gross-Pitevskii-Gleichung (GPE), 150
- Gruppengeschwindigkeit, 132, 134
- gyromagnetischer Faktor, 42
- Hamiltonian
 - Zwei-Niveau-System, 65
- Hankelfunktionen
 - sphärische, 6
- Heisenberg'sche Unschärferelation, 36
- Helmholtz-Gleichung
 - inhomogene, 6
- Hyperfeinstruktur, 43
- Impuls
 - kanonisch konjugierter, 45
 - kinetischer, 45
- Impulsoperator
 - Zwei-Niveau-System, 66
- Interferometer
 - Atomic fountain, 93
 - Ramsey-Bordé, 91
 - Doppler-Verschiebung, 92
- Interferometrie, 72
- Jaynes-Cummings-Modell, 77
- Josephson-Effekt, 63
- kanonische Quantisierung, 46
- kohärente Zustände, 33
 - Eigenschaften, 37
 - Zeitentwicklung von, 36
- Kommutatorrelation
 - Erzeuger und Vernichter, 22
- Kontinuitätsgleichung, 1, 2
- Korrelation, 105
- Ladungserhaltung, 2
- Lagrange-Dichte, 26
- Lamb-Shift, 117
- Landau-Zener-Übergänge, 73
- Laser
 - Kühlen, 123
 - Doughnut-, 95
- Levi-Civita-Symbol, 1
- Lindblad-Form, 117
- Linse
 - Atom, 96
- Liouville
 - Gleichung, 102
 - Superoperator, 102
 - Theorem, 105
- Lorentz
 - Eichung, 5
 - Kraft, 45
- magnetische Monopole, 4
- magnetisches Moment, 42, 44
- makroskopische
 - Felder, 10
 - Maxwell-Gleichungen, 10
- Markov-Näherung, 113
- Master-Gleichung
 - Zwanzigs, 110, 111
 - für atomare Multipletts, 116
 - für Zwei-Niveau-Atome, 116
 - in Markov-Näherung, 114
 - Zwanzigs, 105, 107
- Maxwell-Bloch-Gleichungen, 129, 130, 133
- Maxwell-Gleichungen, 1
 - im Vakuum, 1
 - in Dielektrikum, 129
 - inhomogene, 31
- minimale Kopplung, 46
- Multiplett, 64
- Multipolentwicklung, 6
 - für Vektorfelder, 9
- Multipolmoment
 - sphärisches, 7
- Näherung
 - Thomas-Fermi-, 150
- Nichtlineare Optik, 3
- Operator
 - Zwei-Teilchen-System, 65

- Operatorfunktion, 103
- Ortsoperator
 - Zwei-Niveau-System, 65
- Pauli-Verbot, 19
- Phasengeschwindigkeit, 132
- Photonische Bandlücken, 137
- Potential
 - optisches, 94
 - periodisches, 137
 - skalares, 4
 - Vektor-, 3
- Produkt
 - zeitgeordnetes, 108
- Produktzustand, 105
- Projektions-Superoperatoren, 107
- Pseudopotential, 149
- Punktdipol, 7
- Qbit, 64
- Quadrupolübergänge, 93
- Quasi-Impuls, 139
- Rückstoßverschiebung, 91, 92
- Rabi
 - Frequenz, 67
 - Oszillationen, 70
- Raman-Übergänge, 84
- Raman-Nath-Näherung, 97
- recoil-shift, 91
- Reduzierte Dichtematrix, 105
- reduzierte Matricelement, 60
- Reservoir, 110
- Rotating-Wave-Approximation, 68
- Rotation, 1
- Schrödinger-Gleichung
 - nichtlineare (NLSE), 150
- Schrödinger-Operator für bestimmte Mode, 32
- Schwerpunktbewegung, 89
- Skalare Multipole, 6
- Skalarprodukt
 - erhaltendes, 138
- Solitonen, 151
- Solitons
 - Bright-, 151
 - Dark-, 151
 - Gap-, 152
- Spectral hole burnig, 133
- Spin-Bahn-Kopplung, 43
- Spin-Statistik-Theorem, 20
- spontane
 - Emission, 114
 - Emissionsrate, 117
- Spur, 100
- stationärer Zustand, 130
- STIRAP, 86
- Stoppen von Licht, 135
- Streulänge, 147
- Superoperator, 102
- TE-Felder, 10
- Teilchenzahldarstellung, 20
- Test-Funktion, 157
- Theorem
 - Adiabatisches, 86
- TM-Felder, 10
- Translationsoperator, 138
- Vakuum
 - Verschiebung des, 35
- Variation
 - unter Nebenbedingung, 149
- Vector spherical harmonics, 9
- Vektorpotential, 3
- Verdampfungskühlen, 123
- Vernichter, 22
- Verschiebe-Operator, 34, 35
- Vertauschungsoperator, 19
- Vielteilchentheorie, 26
 - bosonischer Atome, 143
- VSCPT, 127
- Wasserstoffatom, 41
 - Parität, 42
 - Quantenzahlen, 42
- Wechselwirkungsbild, 68

Wellenfunktion

kollektive, 150

Vielteilchen-, 20

Wellengleichungen, 3

Wirbelfeld, 4

zeitgeordnetes

Exponential, 109

Produkt, 108

Zustandsumme, 146

Zwanzigs Master-Gleichung, 105, 107, 110,
111

Näherungen, 110

Zwei-Niveau

Atom, 130

effektives System, 94

System, 63

Zwei-Photonen-Resonanz, 79

Zweite Quantisierung, 25