

# Einführung in die Quantentheorie der elektromagnetischen Strahlung

Peter Schmüser  
Department Physik der Universität Hamburg und DESY

*Vorläufige und unvollständige Version, noch keine endgültige Fehlerkorrektur  
Stand 10. März 2015*

# Inhaltsverzeichnis

<b>1</b>	<b>Algebraische Behandlung des harmonischen Oszillators</b>	<b>3</b>
1.1	Aufsteige- und Absteigeoperatoren . . . . .	3
1.2	Die Wellenfunktionen des Oszillators . . . . .	6
1.3	Quantenübergänge . . . . .	7
<b>2</b>	<b>Quantisierung des elektromagnetischen Feldes</b>	<b>8</b>
2.1	Hamilton-Formalismus . . . . .	9
2.2	Übergang zur Quantentheorie . . . . .	10
<b>3</b>	<b>Emission und Absorption von Strahlung</b>	<b>12</b>
3.1	Absorption und stimulierte Emission in der Quantenmechanik . . . . .	12
3.2	Absorption und Emission in der Quantenfeldtheorie . . . . .	15
3.3	Feldtheoretische Berechnung der spontanen Emission . . . . .	19
3.4	Beziehungen zwischen stimulierter und spontaner Emission . . . . .	19
3.4.1	Nur eine Schwingungsmodus . . . . .	19
3.4.2	Strahlung im thermischen Gleichgewicht mit Materie . . . . .	19
3.5	Strahlung einer periodisch schwingenden Ladung . . . . .	21
3.6	Quantentheoretische Aspekte der Undulatorstrahlung . . . . .	23
<b>4</b>	<b>Weitere Betrachtungen zur Quantenfeldtheorie</b>	<b>25</b>
4.1	Die tiefere Ursache spontaner Quantenübergänge . . . . .	25
4.2	Das Problem der Nullpunktsenergien . . . . .	26

## Kapitel 1

# Algebraische Behandlung des harmonischen Oszillators

In diesem Artikel möchte ich einige Grundzüge der Quantisierung des elektromagnetischen Strahlungsfeldes besprechen. Das Ziel ist es, für die Begriffe *spontane Emission*, *stimulierte Emission* und *Absorption* von Strahlung eine solide theoretische Grundlage zu schaffen. In der zuerst von Paul Dirac entwickelten Quantentheorie des elektromagnetischen Feldes spielt die Quantenmechanik des harmonischen Oszillators eine herausragende Rolle. Aus diesem Grund wird der Oszillator in Kapitel 1 in aller Ausführlichkeit behandelt, jedoch nicht durch analytische Lösung der Schrödinger-Gleichung, da diese Gleichung zwar schwingende Atome in Molekülen oder Kristallen sehr gut beschreiben kann, aber ungeeignet ist, die Schwingungsmoden eines Strahlungsfeldes zu behandeln. Stattdessen werden wir algebraische Methoden betrachten, die sich auf Strahlungsfelder übertragen lassen. Kapitel 2 ist der Quantentheorie des elektromagnetischen Feldes gewidmet. In Kapitel 3 wird die Absorption und Emission von Strahlung durch Atome mit den Methoden der quantenmechanischen Störungsrechnung analysiert und mit den Ausagen der Quantenfeldtheorie verglichen. Die Wahrscheinlichkeit für spontane Emission wird auf der Basis der Quantenfeldtheorie berechnet. Die Strahlungsleistung einer schwingenden Ladung wird quantentheoretisch berechnet, sie stimmt mit der klassischen Larmorformel überein. Daran anschließend werden die quantentheoretischen Aspekte der Undulatorstrahlung behandelt. In Kap. 4 wird auf die Rolle der Vakuumfluktuationen und das Problem der Nullpunktsenergien des quantisierten Strahlungsfeldes eingegangen.

### 1.1 Aufsteige- und Absteigeoperatoren

Als Beispiel eines harmonischen Oszillators wählen wir eine Masse  $m$ , auf die eine rücktreibende Federkraft  $F_x = -\kappa x$  wirkt. Dies trifft auf Atome in Molekülen oder Kristallen zu. Die klassische Hamiltonfunktion ist die Summe von kinetischer und potentieller Energie.

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{\kappa}{2}x^2 = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2x^2, \quad \omega^2 = \frac{\kappa}{m}. \quad (1.1)$$

Um die im folgenden beschriebene algebraische Methode auch auf andere Fälle anwenden zu können, beispielsweise auf elektromagnetische Strahlungsfelder, erweist es sich als nützlich, die Masse zu eliminieren. Das wird gemacht, indem wir verallgemeinerte Koordinaten und Impulse einführen:

$$Q = \sqrt{m}x, \quad P = \frac{p}{\sqrt{m}}. \quad (1.2)$$

Damit lautet die Hamiltonfunktion

$$H = \frac{1}{2}(P^2 + \omega^2Q^2). \quad (1.3)$$

Die Hamiltonschen Gleichungen sind erfüllt:

$$\begin{aligned}\dot{Q} &= \frac{\partial H}{\partial P} = P & \Leftrightarrow m \dot{x} = p, \\ \dot{P} &= -\frac{\partial H}{\partial Q} = -\omega^2 Q & \Leftrightarrow \dot{p} = F_x = -\kappa x.\end{aligned}$$

Der Übergang zur Quantentheorie wird gemacht, indem man die verallgemeinerten Koordinaten und Impulse durch Operatoren ersetzt, die den quantenmechanischen Vertauschungsregeln von Orts- und Impulsoperator genügen:

$$\hat{Q} \hat{P} - \hat{P} \hat{Q} = (\sqrt{m} \hat{x}) \frac{\hat{p}}{\sqrt{m}} - \frac{\hat{p}}{\sqrt{m}} (\sqrt{m} \hat{x}) = \hat{x} \hat{p} - \hat{p} \hat{x} = i \hbar. \quad (1.4)$$

*Zur Erinnerung:* In der Quantenmechanik bedeutet die Anwendung des Ortsoperators die Multiplikation der Wellenfunktion mit der Ortskoordinate, die Anwendung des Impulsoperators die Ableitung der Wellenfunktion:

$$\hat{x} \psi = x \psi, \quad \hat{p} \psi = -i \hbar \frac{\partial \psi}{\partial x}.$$

Diese Operatoren sind nicht vertauschbar, der Kommutator ist

$$[\hat{x} \hat{p} - \hat{p} \hat{x}] \psi = i \hbar \psi.$$

Aus Gl. (1.3) folgt für den Hamiltonoperator

$$\hat{H} = \frac{1}{2} (\hat{P}^2 + \omega^2 \hat{Q}^2). \quad (1.5)$$

Impuls- und Ortsoperator treten hier quadratisch auf. Unser Ziel ist es,  $\hat{H}$  als Produkt von zwei Operatoren darzustellen, die linear in  $\hat{p}$  und  $\hat{x}$  sind. Bei komplexen Zahlen ist eine solche Umformung einfach:  $u^2 + v^2 = (iu + v)(-iu + v)$ . Mit Operatoren wird es komplizierter, da  $\hat{Q}$  und  $\hat{P}$  nicht kommutieren. Wir definieren die folgenden Operatoren

$$\hat{C}^+ = \frac{1}{\sqrt{2\hbar\omega}} (-i \hat{P} + \omega \hat{Q}), \quad \hat{C}^- = \frac{1}{\sqrt{2\hbar\omega}} (i \hat{P} + \omega \hat{Q}). \quad (1.6)$$

Diese Operatoren sind reell, da  $i \hat{P} = (\hbar/\sqrt{m}) \partial_x$  reell ist. Weiterhin gilt:  $\hat{C}^+$  ist der adjungierte Operator<sup>1</sup> zu  $\hat{C}^-$  und umgekehrt. Dies folgt aus der Definitionsgleichung (1.6) und der Tatsache, dass  $\hat{Q}$  und  $\hat{P}$  selbstadjungierte Operatoren sind:  $\hat{Q}^\dagger = \hat{Q}$  und  $\hat{P}^\dagger = \hat{P}$ . Wir berechnen  $(\hat{C}^+)^{\dagger}$  explizit:

$$(\hat{C}^+)^{\dagger} = \frac{1}{\sqrt{2\hbar\omega}} (-i \hat{P} + \omega \hat{Q})^{\dagger} = \frac{1}{\sqrt{2\hbar\omega}} (+i \hat{P}^\dagger + \omega \hat{Q}^\dagger) = \hat{C}^-.$$

Ganz entsprechend beweist man die Beziehung

$$(\hat{C}^-)^{\dagger} = \hat{C}^+.$$

---

<sup>1</sup>Zu einem Operator  $\hat{A}$  definiert man den adjungierten Operator  $\hat{A}^\dagger$  durch die Gleichung

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \phi^*(x) (\hat{A} \psi(x)) dx = \int_{-\infty}^{+\infty} (\hat{A}^\dagger \phi(x))^* \psi(x) dx.$$

Ein Operator heißt *selbstadjungiert* oder *hermitesch*, wenn  $\hat{A}^\dagger = \hat{A}$  gilt. Die Eigenwerte selbstadjungierter Operatoren sind reell. Für weitere Details siehe [1], Anhang C.

Jetzt bilden wir das Produkt der Operatoren (1.6).

$$\begin{aligned}\widehat{C}^+ \widehat{C}^- &= \frac{1}{2\hbar\omega} (-i\widehat{P} + \omega\widehat{Q})(+i\widehat{P} + \omega\widehat{Q}) \\ &= \frac{1}{2\hbar\omega} \left( \widehat{P}^2 + \omega^2 \widehat{Q}^2 \right) + \frac{i}{2\hbar} \underbrace{(\widehat{Q}\widehat{P} - \widehat{P}\widehat{Q})}_{i\hbar}.\end{aligned}$$

Daraus folgen die wichtigen Darstellungen des Hamilton-Operators durch Produkte der linearen  $C$ -Operatoren:

$$\widehat{H} = \hbar\omega \left( \widehat{C}^+ \widehat{C}^- + \frac{1}{2} \right) = \hbar\omega \left( \widehat{C}^- \widehat{C}^+ - \frac{1}{2} \right) = \frac{\hbar\omega}{2} \left( \widehat{C}^+ \widehat{C}^- + \widehat{C}^- \widehat{C}^+ \right). \quad (1.7)$$

Der Kommutator von  $\widehat{C}^+$  und  $\widehat{C}^-$  ergibt sich zu

$$[\widehat{C}^-, \widehat{C}^+] = \widehat{C}^- \widehat{C}^+ - \widehat{C}^+ \widehat{C}^- = 1. \quad (1.8)$$

Wir werden sehen, dass  $\widehat{C}^+$  dem Aufsteigeoperator  $\widehat{J}_+$  im Drehimpulsformalismus entspricht und  $\widehat{C}^-$  dem Absteigeoperator  $\widehat{J}_-$ .

Sei  $\psi$  eine Eigenfunktion des Hamiltonoperators mit dem Eigenwert  $E$ . Jetzt kommt der entscheidende Schritt.

*Behauptung:*

- (1)  $\phi = \widehat{C}^+ \psi$  ist eine Eigenfunktion von  $\widehat{H}$  mit dem Eigenwert  $E + \hbar\omega$ ,
- (2)  $\chi = \widehat{C}^- \psi$  ist eine Eigenfunktion von  $\widehat{H}$  mit dem Eigenwert  $E - \hbar\omega$  (sofern  $\widehat{C}^- \psi \neq 0$  ist).

*Beweis:*

Wir wenden den Hamiltonoperator (1.7) auf  $\phi = \widehat{C}^+ \psi$  an.

$$\begin{aligned}\widehat{H} \phi &= \hbar\omega \widehat{C}^+ \underbrace{\widehat{C}^- \widehat{C}^+}_{\widehat{C}^+ \widehat{C}^- + 1} \psi + \frac{\hbar\omega}{2} \widehat{C}^+ \psi = \widehat{C}^+ \underbrace{\hbar\omega \left( \widehat{C}^+ \widehat{C}^- + \frac{1}{2} \right) \psi}_{E\psi} + \hbar\omega \widehat{C}^+ \psi \\ &= (E + \hbar\omega) \widehat{C}^+ \psi.\end{aligned} \quad (1.9)$$

Es gilt also wie behauptet

$$\widehat{H} \phi = (E + \hbar\omega) \phi.$$

Ganz entsprechend beweist man

$$\widehat{H} \chi = (E - \hbar\omega) \chi.$$

Der Absteigeoperator  $\widehat{C}^-$  vermindert die Energie des Oszillators in diskreten Schritten von  $\hbar\omega$ . Die Energie darf aber nicht negativ werden, denn der Minimalwert der potentiellen Energie  $V(x) = (\kappa/2)x^2$  ist  $V(0) = 0$ , und die kinetische Energie ist immer  $\geq 0$ . Es muss daher eine minimale Energie  $E_0$  existieren, und die Anwendung von  $\widehat{C}^-$  auf die zugehörige Eigenfunktion  $\psi_0$  darf keine weitere Eigenfunktion von  $\widehat{H}$  mit noch niedrigerer Energie ergeben. Das ist gewährleistet, wenn

$$\widehat{C}^- \psi_0 = 0$$

wird, denn damit hört die Absteigeleiter auf. Was bedeutet diese Bedingung? Wir multiplizieren die Gleichnung  $\widehat{C}^- \psi_0 = 0$  von links mit  $\hbar\omega \widehat{C}^+$  und erhalten

$$0 = \hbar\omega \widehat{C}^+ \widehat{C}^- \psi_0 = \left( \widehat{H} - \frac{\hbar\omega}{2} \right) \psi_0.$$

Daraus folgt

$$\widehat{H} \psi_0 = \frac{\hbar\omega}{2} \psi_0 = E_0 \psi_0. \quad (1.10)$$

Damit ist bewiesen, dass die minimale Energie des harmonischen Oszillators den Wert  $E_0 = \hbar\omega/2$  hat und dass die Energiewerte allgemein durch die Formel

$$E_n = \left( n + \frac{1}{2} \right) \hbar\omega, \quad n = 0, 1, 2, 3 \dots \quad (1.11)$$

gegeben sind.

## 1.2 Die Wellenfunktionen des Oszillators

Die Wellenfunktion des Grundzustands lässt sich leicht berechnen. Aus

$$\hat{C}^- \psi_0 = \frac{1}{\sqrt{2\hbar\omega}} \left( \frac{\hbar}{\sqrt{m}} \frac{d}{dx} + \sqrt{m} \omega x \right) \psi_0 = 0$$

folgt die Differentialgleichung

$$\frac{d\psi_0}{dx} = -\frac{m\omega}{\hbar} x \psi_0$$

mit der Lösung

$$\psi_0(x) = A_0 \exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar} x^2\right).$$

Wendet man wiederholt den Aufsteigeoperator an, so ergeben sich aus  $\psi_0$  die Eigenfunktionen  $\psi_1(x)$ ,  $\psi_2(x)$ ,  $\psi_3(x)$ , ..., allerdings nicht mit der korrekten Normierung.

$$\psi_1(x) \propto \hat{C}^+ \psi_0(x), \quad \psi_2(x) \propto \hat{C}^+ \psi_1(x) \quad \psi_3(x) \propto \hat{C}^+ \psi_2(x), \dots$$

Die korrekt normierten Eigenfunktionen lauten

$$\psi_n(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} H_n(u) \exp(-u^2/2) \quad \text{mit } u = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x. \quad (1.12)$$

Die  $H_n(u)$  sind die Hermite'schen Polynome

$$\begin{aligned} H_0(u) &= 1, & H_1(u) &= 2u, \\ H_2(u) &= 4u^2 - 2, & H_3(u) &= 8u^3 - 12u, \dots \end{aligned} \quad (1.13)$$

Alle diese Funktionen haben die Norm 1

$$\langle \psi_n | \psi_n \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi_n^*(x) \psi_n(x) dx = 1. \quad (1.14)$$

### Anwendung der Leiteroperatoren

Wir wollen nun die Wirkung der Leiteroperatoren auf die Wellenfunktionen (1.12) quantitativ analysieren. Wir wissen bereits, dass  $\hat{C}^+ \psi_n$  proportional zu  $\psi_{n+1}$  ist und  $\hat{C}^- \psi_n$  proportional zu  $\psi_{n-1}$ , aber die Proportionalitätskonstanten sind noch unbekannt.

*Behauptung:*

$$\hat{C}^+ \psi_n = \sqrt{n+1} \psi_{n+1}, \quad \hat{C}^- \psi_n = \sqrt{n} \psi_{n-1}.$$

(1.15)

*Beweis:*

Um die erste Relation zu beweisen, machen wir den Ansatz

$$\phi \equiv \hat{C}^+ \psi_n = c_n \psi_{n+1}$$

mit einer unbekannten reellen Zahl<sup>2</sup>  $c_n$ . Zur Bestimmung von  $c_n$  berechnen die Norm von  $\phi$  auf zwei Wegen.

$$\begin{aligned} (1) \quad \langle \phi | \phi \rangle &= |c_n|^2 \langle \psi_{n+1} | \psi_{n+1} \rangle = c_n^2. \\ (2) \quad \langle \phi | \phi \rangle &= \langle \hat{C}^+ \psi_n | \hat{C}^+ \psi_n \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} (\hat{C}^+ \psi_n(x))^* \hat{C}^+ \psi_n(x) dx. \end{aligned}$$

---

<sup>2</sup>Der Koeffizient  $c_n$  ist reell, weil  $\hat{C}^+$  ein reeller Operator ist.

Jetzt wird ausgenutzt, dass  $\hat{C}^+$  der adjungierte Operator zu  $\hat{C}^-$  ist, um den Ausdruck (2) umzuformen.

$$\begin{aligned}\int_{-\infty}^{\infty} (\hat{C}^+ \psi_n(x))^* \hat{C}^+ \psi_n(x) dx &= \int_{-\infty}^{\infty} ((\hat{C}^+)^{\dagger} \hat{C}^+ \psi_n(x))^* \psi_n(x) dx \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} (\hat{C}^- \hat{C}^+ \psi_n(x))^* \psi_n(x) dx.\end{aligned}$$

Aus Gl. (1.7) folgt

$$\hat{C}^- \hat{C}^+ = \frac{1}{\hbar \omega} \hat{H} + \frac{1}{2} \Rightarrow \hat{C}^- \hat{C}^+ \psi_n = (n + 1) \psi_n.$$

Die Kombination der Auswertungen (1) und (2) ergibt  $c_n = \sqrt{n+1}$ , was zu beweisen war. Der Beweis der Relation

$$\hat{C}^- \psi_n = \sqrt{n} \psi_{n-1}$$

verläuft ganz analog. Aus der ersten Gleichung (1.15) folgt, dass man die normierten Wellenfunktionen  $\psi_n$  mit Hilfe der Formel

$$\psi_n = \frac{1}{\sqrt{n!}} (\hat{C}^+)^n \psi_0 \quad (1.16)$$

aus der Wellenfunktion des Grundzustands berechnen kann.

### 1.3 Quantenübergänge

In [1], Kapitel 10, werden die optischen Dipolübergänge in Atomen behandelt. Auch bei einer schwingenden Ladung  $q$  kann es Dipolübergänge unter Emission oder Absorption von Strahlung geben. Wir wollen untersuchen, wie sich dabei die Quantenzahl  $n$  ändert, und das Dipol-Matrixelement berechnen.

*Behauptung:*

Es gilt die Auswahlregel

$$\Delta n = \pm 1. \quad (1.17)$$

*Beweis:*

Bei einem Dipolübergang müssen wir das Übergangs-Matrixelement des elektrischen Dipolmoments  $q x$  zwischen dem Anfangszustand  $\psi_n$  und dem Endzustand  $\psi_m$  berechnen:

$$q x_{mn} = q \langle \psi_m | \hat{x} | \psi_n \rangle = \frac{q}{\sqrt{m}} \langle \psi_m | \hat{Q} | \psi_n \rangle.$$

Aus Gl. (1.6) folgt

$$\hat{Q} = \sqrt{\frac{\hbar}{2 \omega}} (\hat{C}^+ + \hat{C}^-),$$

d.h. wir müssen uns die Übergangs-Matrixelemente der Aufsteige- und Absteigeoperatoren ansehen. Die Gleichungen (1.15) zeigen, dass diese nur für  $m = n \pm 1$  von null verschieden sind.

Das Matrixelement für einen Übergang vom Anfangszustand (initial state)  $\psi_i = \psi_n$  in den Endzustand (final state)  $\psi_f = \psi_{n-1}$  unter Emission eines Photons hat den Wert

$$x_{fi} = x_{n-1, n} = \sqrt{\frac{n \hbar}{2 m \omega}}. \quad (1.18)$$

## Kapitel 2

### Quantisierung des elektromagnetischen Feldes

Dieser Abschnitt ist eine kurze Einführung in die Quantentheorie des elektromagnetischen Feldes im Vakuum. Sie basiert auf einem hervorragenden Physics Today Artikel von V. Weisskopf [2]. In der mathematischen Formulierung folge ich den Lehrbüchern von L. D. Landau und E. M. Lifschitz [3], W. Heitler [4] und R. Becker [5]. In diesen Büchern wird das Gauß'sche Maßsystem verwendet, ich schreibe die Formeln in SI-Einheiten um.

Sei  $\mathbf{A}$  das Vektorpotential des freien elektromagnetischen Wellenfeldes, das der Coulomb-Eichung

$$\nabla \cdot \mathbf{A} = 0$$

genügt. Das skalare Potential ist  $\Phi = 0$ . Das Vektorpotential erfüllt die Wellengleichung

$$\nabla^2 \mathbf{A} - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \mathbf{A}}{\partial t^2} = 0. \quad (2.1)$$

Um den Formalismus der Quantentheorie anwenden zu können, geht man von den kontinuierlichen Variablen der klassischen Elektrodynamik zu diskreten Variablen über, indem man die Felder nur in einem sehr großen, aber endlichen Kasten mit dem Volumen  $V = L^3$  betrachtet und periodische Randbedingungen stellt. Dass bedeutet, jede Feldgröße  $f(x, y, z)$  muss die Bedingungen

$$f(x, y, z) = f(x + L, y, z) = f(x, y + L, z) = f(x, y, z + L) \quad (L \gg \lambda) \quad (2.2)$$

erfüllen. Die Kantenlänge  $L$  sollte extrem groß im Vergleich zur Wellenlänge  $\lambda$  sein. Die allgemeine Lösung der Wellengleichung (2.1) kann dann als Fourierreihe dargestellt werden

$$\mathbf{A}(\mathbf{r}, t) = \sum_{\mathbf{k}, s} \mathbf{e}_{\mathbf{k}, s} [a_{\mathbf{k}}(t) \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}) + a_{\mathbf{k}}^*(t) \exp(-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r})], \quad k = |\mathbf{k}| = \frac{\omega_k}{c}. \quad (2.3)$$

Die komplexen Koeffizienten  $a_{\mathbf{k}}$  enthalten die Zeitabhängigkeit des Vektorpotentials,  $a_{\mathbf{k}}(t) \propto \exp(-i\omega_k t)$ . Die Polarisation der Wellen wird durch die Einheitsvektoren  $\mathbf{e}_{\mathbf{k}, 1}$  und  $\mathbf{e}_{\mathbf{k}, 2}$  beschrieben, die wegen der Coulomb-Eichung  $\nabla \cdot \mathbf{A} = 0$  senkrecht auf den zugehörigen Wellenzahlvektoren stehen (elektromagnetische Wellen im Vakuum sind transversal) und die zueinander orthogonal sind

$$\mathbf{k} \cdot \mathbf{e}_{\mathbf{k}, s} = 0, \quad \mathbf{e}_{\mathbf{k}, 1} \cdot \mathbf{e}_{\mathbf{k}, 2} = 0.$$

Um die Periodizität des Vektorpotentials zu gewährleisten, müssen die Komponenten jedes der Wellenvektoren wie folgt berechnet werden

$$k_1 = m_1 \frac{2\pi}{L}, \quad k_2 = m_2 \frac{2\pi}{L}, \quad k_3 = m_3 \frac{2\pi}{L}, \quad (2.4)$$

wobei die  $m_i$  beliebige ganze Zahlen sind. Es gibt unendlich viele  $\mathbf{k}$ -Vektoren, aber wegen Gl. (2.4) ist ihre Menge abzählbar. Im Frequenzbereich lautet die Zustandsdichte der Photonen (siehe [1], Anhang B)

$$\rho(\omega) = \frac{L^3 \omega^2}{\pi^2 c^3}. \quad (2.5)$$

Dabei ist  $\rho(\omega) \Delta\omega$  die Zahl der im Normierungsvolumen  $L^3$  enthaltenen Eigenzustände des elektromagnetischen Feldes im Frequenzintervall  $[\omega, \omega + \Delta\omega]$ . Die Zustandsdichte als Funktion der Energie  $E = \hbar\omega$  ist

$$\rho(E) = \frac{L^3 (\hbar\omega)^2}{\hbar^3 \pi^2 c^3} = \frac{L^3 \omega^2}{\hbar \pi^2 c^3}. \quad (2.6)$$

## 2.1 Hamilton-Formalismus

Für den Übergang zur Quantentheorie ist es sinnvoll, kanonische Variable  $Q_{\mathbf{k}}$ ,  $P_{\mathbf{k}}$  einzuführen, damit die Energie des elektromagnetischen Feldes als Hamiltonfunktion geschrieben werden kann. Diese Variablen werden wie folgt definiert

$$Q_{\mathbf{k}}(t) = \sqrt{\epsilon_0 L^3} (a_{\mathbf{k}} + a_{\mathbf{k}}^*), \quad P_{\mathbf{k}}(t) = -i \omega_k \sqrt{\epsilon_0 L^3} (a_{\mathbf{k}} - a_{\mathbf{k}}^*). \quad (2.7)$$

Sie sind offensichtlich reell.

Die zeitlichen Ableitungen sind wegen  $a_{\mathbf{k}}(t) \propto \exp(-i\omega_k t)$

$$\frac{\partial Q_{\mathbf{k}}}{\partial t} = P_{\mathbf{k}}, \quad \frac{\partial P_{\mathbf{k}}}{\partial t} = -\omega_k^2 Q_{\mathbf{k}}. \quad (2.8)$$

Das Vektorpotential wird damit

$$\mathbf{A} = \frac{1}{\sqrt{\epsilon_0 L^3}} \sum_{\mathbf{k}, s} \mathbf{e}_{\mathbf{k}, s} \left[ Q_{\mathbf{k}} \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}) - \frac{1}{\omega_k} P_{\mathbf{k}} \sin(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}) \right]. \quad (2.9)$$

Um die weiteren Schritte und Gedankengänge zu verdeutlichen und die Nomenklatur zu vereinfachen, greife ich zunächst einen Term aus der Fouriersumme heraus, der eine in positiver  $z$ -Richtung laufende ebene Welle mit horizontaler Polarisation beschreibt. Dann hat  $\mathbf{A}$  nur eine  $x$ -Komponente

$$A_x(z, t) = \frac{1}{\sqrt{\epsilon_0 L^3}} \left[ Q \cos(k z) - \frac{1}{\omega} P \sin(k z) \right].$$

Die verallgemeinerten Koordinaten und Impulse werden mit  $Q$  und  $P$  bezeichnet; der Index  $k$  ist hier unnötig und wird weggelassen, und auch die Zeitabhängigkeit wird nicht explizit hingeschrieben. Die Felder  $\mathcal{E}$  und  $\mathcal{B}$  werden wie folgt berechnet:

$$\mathcal{E} = -\frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t}, \quad \mathcal{B} = \nabla \times \mathbf{A}$$

und ergeben sich zu

$$\begin{aligned} \mathcal{E}_x &= -\frac{1}{\sqrt{\epsilon_0 L^3}} [P \cos(k z) - \omega Q \sin(k z)], \\ \mathcal{B}_y &= \frac{1}{\sqrt{\epsilon_0 L^3}} \left[ -k Q \sin(k z) - \frac{k}{\omega} P \cos(k z) \right]. \end{aligned}$$

Die Feldenergie ist identisch mit der Hamiltonfunktion des elektromagnetischen Feldes

$$H = \int \left( \frac{\epsilon_0}{2} \mathcal{E}^2 + \frac{1}{2\mu_0} \mathcal{B}^2 \right) d^3 r = \frac{\epsilon_0}{2} \int (\mathcal{E}^2 + c^2 \mathcal{B}^2) d^3 r. \quad (2.10)$$

Die Integration erstreckt sich über das Volumen  $L^3$  des Kastens. Wenn wir die obigen Felder einsetzen und quadrieren, so treten Produkte der Cosinus- und Sinusfunktionen auf, die wir im Integral durch ihre Mittelwerte ersetzen können:

$$\overline{\cos^2(k z)} = \overline{\sin^2(k z)} = 1/2, \quad \overline{\sin(k z) \cos(k z)} = 0.$$

Damit wird die Hamiltonfunktion

$$H = \frac{1}{2} (P^2 + \omega^2 Q^2). \quad (2.11)$$

Dies ist ein außerordentlich wichtiges Resultat:

*Die Hamiltonfunktion einer elektromagnetischen Welle ist identisch mit der Hamiltonfunktion eines harmonischen Oszillators.*

Die Gleichungen (2.8) stimmen mit den Hamilton-Gleichungen überein:

$$\dot{Q} = \frac{\partial H}{\partial P}, \quad \dot{P} = -\frac{\partial H}{\partial Q}. \quad (2.12)$$

Diese Resultate lassen sich problemlos auf den allgemeinen Fall übertragen, bei dem das Vektorpotential durch die Fourierreihe (2.3) beschrieben wird. Beim Quadrieren der Felder treten viele gemischte Terme der Form  $\cos(\mathbf{k}_i \cdot \mathbf{r}) \cos(\mathbf{k}_j \cdot \mathbf{r})$  oder  $\sin(\mathbf{k}_i \cdot \mathbf{r}) \sin(\mathbf{k}_j \cdot \mathbf{r})$  auf, die sich aber bei der Integration über den Raum alle wegmitteln:

$$\overline{\cos(\mathbf{k}_i \cdot \mathbf{r}) \cos(\mathbf{k}_j \cdot \mathbf{r})} = \overline{\sin(\mathbf{k}_i \cdot \mathbf{r}) \sin(\mathbf{k}_j \cdot \mathbf{r})} = 0 \quad \text{wenn } \mathbf{k}_i \neq \mathbf{k}_j.$$

Daher erhalten wir das einfache Resultat

$$H = \sum_{\mathbf{k}, s} \frac{1}{2} (P_{\mathbf{k}}^2 + \omega_{\mathbf{k}}^2 Q_{\mathbf{k}}^2). \quad (2.13)$$

Diese Hamiltonfunktion beschreibt ein Ensemble von abzählbar vielen harmonischen Oszillatoren, die unabhängig voneinander schwingen und nicht gekoppelt sind.

## 2.2 Übergang zur Quantentheorie

Der Hamiltonformalismus erlaubt es, die Resultate direkt in eine quantentheoretische Form zu überführen. Zur Vereinfachung der Schreibweise betrachten wir zunächst wieder den Fall, dass nur eine Schwingungsmodus vorliegt. Die verallgemeinerten Koordinaten und Impulse  $Q$  und  $P$  werden durch die Operatoren  $\hat{Q}$  und  $\hat{P}$  ersetzt, und die Hamiltonfunktion (2.11) geht in den Hamiltonoperator  $\hat{H}$  über

$$\hat{H} = \frac{1}{2} (\hat{P}^2 + \omega^2 \hat{Q}^2). \quad (2.14)$$

Der Index  $k$  ist hier unnötig und wird weggelassen. Gleichung (2.14) zeigt, dass wir den quantenmechanischen Formalismus des harmonischen Oszillators anwenden können. Insbesonders gibt es äquidistante Energieniveaus

$$E_n = n \hbar \omega + \hbar \omega/2, \quad n = 0, 1, 2, \dots. \quad (2.15)$$

Die ganze Zahl  $n$  gibt die Zahl der Photonen an, die alle die Energie  $\hbar \omega$  haben, und  $\hbar \omega/2$  ist die Nullpunktenergie des elektromagnetischen Feldes.

Die Eigenzustände von  $\hat{H}$  werden in Dirac-Schreibweise mit  $|n\rangle$  benannt.

$$\hat{H} |n\rangle = (n + 1/2) \hbar \omega |n\rangle.$$

Der Grundzustand, auch *Vakuum* genannt, ist  $|0\rangle$ .

Die Leiteroperatoren des harmonischen Oszillators sind auch hier nützlich

$$\hat{C}^+ = \frac{1}{\sqrt{2 \hbar \omega}} (-i \hat{P} + \omega \hat{Q}), \quad \hat{C}^- = \frac{1}{\sqrt{2 \hbar \omega}} (i \hat{P} + \omega \hat{Q}). \quad (2.16)$$

Wenden wir diese Operatoren auf einen Zustand  $|n\rangle$  an, so folgt aus Gl. (1.15)

$$\boxed{\hat{C}^+ |n\rangle = \sqrt{n+1} |n+1\rangle, \quad \hat{C}^- |n\rangle = \sqrt{n} |n-1\rangle.} \quad (2.17)$$

Man nennt  $\hat{C}^+$  den *Erzeugungsoperator* eines Photons, weil er die Zahl der Photonen um 1 erhöht, und  $\hat{C}^-$  heisst *Vernichtungsoperator*. Der Zustand  $|n\rangle$  kann durch  $n$ -fache Anwendung des Erzeugungsoperators aus dem Vakuumzustand gewonnen werden. Korrekt normiert lautet er

$$|n\rangle = \frac{(\hat{C}^+)^n}{\sqrt{n!}} |0\rangle. \quad (2.18)$$

Im allgemeinen Fall mit unendlich vielen Schwingungsmoden lautet der Hamiltonoperator und die Eigenzustände

$$\hat{H} = \sum_{\mathbf{k}, s} \frac{1}{2} (\hat{P}_{\mathbf{k}}^2 + \omega_{\mathbf{k}}^2 \hat{Q}_{\mathbf{k}}^2), \quad | \dots, n_{\mathbf{k}}, \dots, n_{\mathbf{k}'}, \dots \rangle. \quad (2.19)$$

Der Grundzustand (das *absolute Vakuum*) ist  $|0, 0, 0 \dots\rangle$ .

Die Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren werden für jede Schwingungsmodus definiert und erfüllen die Vertauschungsrelation (1.8)

$$\hat{C}_{\mathbf{k}}^- \hat{C}_{\mathbf{k}}^+ - \hat{C}_{\mathbf{k}}^+ \hat{C}_{\mathbf{k}}^- = 1. \quad (2.20)$$

Die zu verschiedenen  $\mathbf{k}$ -Vektoren gehörigen Leiteroperatoren sind vertauschbar

$$\hat{C}_{\mathbf{k}}^- \hat{C}_{\mathbf{k}'}^+ - \hat{C}_{\mathbf{k}'}^+ \hat{C}_{\mathbf{k}}^- = 0 \quad \text{wenn } \mathbf{k} \neq \mathbf{k}'. \quad (2.21)$$

Der allgemeine Eigenzustand des Hamiltonoperators wird durch wiederholte Anwendung der Erzeugungsoperatoren aus dem Vakuumzustand gewonnen

$$| \dots, n_{\mathbf{k}}, \dots, n_{\mathbf{k}'}, \dots \rangle = \prod_{\mathbf{k}, s} \frac{(\hat{C}_{\mathbf{k}}^+)^{n_{\mathbf{k}}}}{\sqrt{n_{\mathbf{k}}!}} |0, 0, 0 \dots\rangle. \quad (2.22)$$

## Kapitel 3

### Emission und Absorption von Strahlung

Als Modellsystem betrachten wir ein Wasserstoff-Atom und beschränken uns auf die beiden niedrigsten Energieniveaus  $E_1 = E_{1s}$  und  $E_2 = E_{2p}$ . Wenn sich das Elektron im Grundzustand  $\psi_1$  befindet, kann es durch *Absorption* eines Photons (Lichtquants) der Energie  $\hbar\omega_\ell = E_2 - E_1$  in den angeregten Zustand  $\psi_2$  übergehen. Für den Übergang vom angeregten Zustand  $\psi_2$  in den Grundzustand  $\psi_1$  unter Emission eines Photons gibt es zwei Möglichkeiten: die *spontane Emission*, die “von selbst” abläuft, und die *stimulierte Emission*, die durch ein bereits vorhandenes Strahlungsfeld induziert wird. In Abb. 3.1 sind die drei mit Photon-Emission oder Photon-Absorption verknüpften Prozesse schematisch dargestellt.

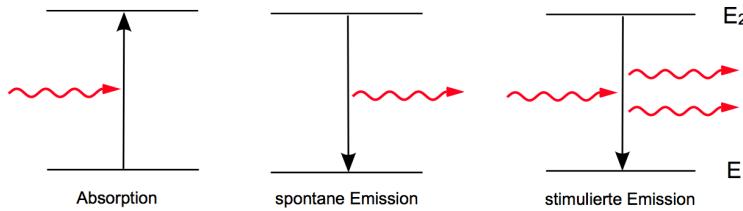


Abbildung 3.1: *Absorption, spontane Emission und stimulierte Emission von Photonen. In allen drei Fällen ist  $\hbar\omega_\ell = E_2 - E_1$ .*

Die Absorption und die stimulierte Emission können mit der quantenmechanischen Störungsrechnung quantitativ berechnet werden. Dies wird im nächsten Abschnitt gezeigt. Die nichtrelativistische Schrödinger-Gleichung ist jedoch nicht imstande, die spontane Emission zu beschreiben, und selbst die relativistische Dirac-Gleichung ist dafür ungeeignet. Die Eigenzustände des ungestörten Hamiltonoperators sind *stationär*: wenn sich das Elektron in einem angeregten Zustand befindet, so wird es - laut Quantenmechanik - für ewige Zeiten dort bleiben, es sei denn, eine externe Störung bewirkt die Rückkehr in den Grundzustand.

Um die spontane Emission zu erkären, muss man nicht nur die Teilchen quantentheoretisch behandeln, sondern auch noch das elektromagnetische Strahlungsfeld (diese von Paul Dirac eingeführte Methode wurde 2. Quantisierung genannt).

#### 3.1 Absorption und stimulierte Emission in der Quantenmechanik

In der nichtrelativistischen Quantenmechanik wird die zeitabhängige Störungsrechnung angewandt, um den Übergang eines Elektrons von einem atomaren Energieniveau auf ein anderes unter dem Einfluss elektromagnetischer Strahlung zu berechnen. Optische Übergänge werden durch eine “semi-klassische” Methode erfasst: die Elektronen im Atom werden quantentheoretisch durch die Eigenfunktionen  $\psi$  des Hamiltonoperators  $\hat{H}_0$  beschrieben, während das elektromagnetische Strahlungsfeld als klassisches oszillierendes Feld behandelt wird. Zur Vereinfachung betrachten wir ein elektrisches Wechselfeld in  $x$ -Richtung, beispielsweise eine stehende Lichtwelle im optischen Resonator eines Lasers. Das Atom befindet sich im Nullpunkt des Koordinatensystems. Das elektrische Feld am Ort des Atoms lautet

$$\mathcal{E}_x(t) = \mathcal{E}_0 \cos \omega_\ell t = \frac{\mathcal{E}_0}{2} (e^{i\omega_\ell t} + e^{-i\omega_\ell t}). \quad (3.1)$$

Der zeitabhängige Wechselwirkungsterm  $\widehat{W}(t)$  ist in diesem Fall die potentielle Energie des Elektrons im Feld  $\mathcal{E}_x(t)$ :

$$\widehat{W}(t) = e \mathcal{E}_x(t) \widehat{x} = \frac{e \mathcal{E}_0}{2} (e^{i\omega_\ell t} + e^{-i\omega_\ell t}) \widehat{x}, \quad (3.2)$$

so dass der Hamilton-Operator nun lautet

$$\widehat{H}(t) = \widehat{H}^{(0)} + \widehat{W}(t) \quad \text{mit} \quad \widehat{H}^{(0)} = -\frac{\hbar^2}{2m_e} \nabla^2 - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r}. \quad (3.3)$$

Zum Zeitpunkt  $t = 0$  sei das Elektron im Zustand  $\psi_i$  (*initial state*,  $i \equiv (n, l, m_l)_i$ ).

Im Zeitbereich  $0 < t < T$  erfüllt die Wellenfunktion die Schrödinger-Gleichung

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = (\widehat{H}^{(0)} + \widehat{W}(t))\psi \quad (3.4)$$

und ist daher keine Eigenfunktion von  $\widehat{H}^{(0)}$ . Wir können sie aber (bei einer “kleinen” Störung) als Linearkombination der Eigenfunktionen mit zeitabhängigen Koeffizienten ansetzen:

$$\psi(\mathbf{r}, t) = c_i(t) \psi_i(\mathbf{r}, t) + \sum_{j \neq i} c_j(t) \psi_j(\mathbf{r}, t) \quad (3.5)$$

mit der Anfangsbedingung  $c_i(0) = 1$ ,  $c_j(0) = 0$ . Der gewünschte Endzustand (*final state*)  $\psi_f$  befindet sich unter den  $\psi_j$ .

Damit der Übergang  $\psi_i \rightarrow \psi_f$  mit einer signifikanten Wahrscheinlichkeit eintreten kann, muss die Frequenz eine Resonanzbedingung erfüllen

$$\omega_\ell \approx |E_f - E_i|/\hbar, \quad (3.6)$$

wobei eine gewisse Unschärfe zugelassen ist in Einklang mit der Unschärferelation. Diese Unschärfe ergibt sich automatisch, wenn das Feld nur für eine kurze Zeit  $0 < t < T$  einwirkt. Die Begrenzung auf ein endliches Zeitintervall hat zur Folge, dass die elektromagnetische Strahlung nicht mehr exakt monochromatisch ist, sondern ein endliches Frequenzband  $\omega_\ell \pm \delta\omega$  überstreicht mit  $\delta\omega \approx \pi/T$ .

Aufgrund der Resonanzbedingung dominiert in der Summe (3.5) der Term  $j = f$  so stark, dass man die übrigen Terme weglassen kann. Unsere vereinfachte Wellenfunktion lautet für  $t > 0$

$$\psi(\mathbf{r}, t) = c_i(t) \psi_i(\mathbf{r}, t) + c_f(t) \psi_f(\mathbf{r}, t). \quad (3.7)$$

Einsetzen in die Schrödinger-Gleichung ergibt unter Benutzung der Gleichungen

$$i\hbar \frac{\partial \psi_i}{\partial t} = \widehat{H}^{(0)} \psi_i, \quad i\hbar \frac{\partial \psi_f}{\partial t} = \widehat{H}^{(0)} \psi_f$$

die folgende Differentialgleichung für die Koeffizienten  $c_i$  und  $c_f$

$$i\hbar \dot{c}_i |\psi_i\rangle + i\hbar \dot{c}_f |\psi_f\rangle = c_i(t) \widehat{W}(t) |\psi_i\rangle + c_f(t) \widehat{W}(t) |\psi_f\rangle. \quad (3.8)$$

Hier wird die Dirac-Schreibweise benutzt. Um die zeitliche Entwicklung der Amplitude  $c_f(t)$  des Endzustands zu ermitteln, wird die Gleichung skalar mit  $\langle \psi_f |$  multipliziert und die Orthogonalität und Normierung der  $\psi_j$  ausgenutzt

$$i\hbar \dot{c}_f = c_i(t) \langle \psi_f | \widehat{W} | \psi_i \rangle + c_f(t) \langle \psi_f | \widehat{W} | \psi_f \rangle. \quad (3.9)$$

Nun gilt für dies spezielle Potential

$$\langle \psi_f | \widehat{W} | \psi_f \rangle \sim \int |\psi_f(\mathbf{r})|^2 x d^3r = 0,$$

da der Integrand eine ungerade Funktion in  $x$  ist. Daher folgt

$$i\hbar \dot{c}_f = c_i(t) \langle \psi_f | \widehat{W} | \psi_i \rangle. \quad (3.10)$$

Wenn die Störung  $W$  schwach ist und nur für kurze Zeit wirkt, gilt  $|c_i(t)| \approx 1$  und  $|c_f(t)| \ll 1$  im Intervall  $0 < t < T$ , und wir erhalten die vereinfachte Gleichung

$$i\hbar \dot{c}_f = c_i(0) \langle \psi_f | \widehat{W} | \psi_i \rangle = \langle \psi_f | \widehat{W} | \psi_i \rangle . \quad (3.11)$$

Wir schreiben das sog. *Übergangs-Matrixelement* des Störterms  $\widehat{W}$  explizit hin

$$\langle \psi_f | \widehat{W} | \psi_i \rangle = \frac{\mathcal{E}_0}{2} e x_{fi} [e^{i(\omega_{fi} + \omega_\ell)t} + e^{i(\omega_{fi} - \omega_\ell)t}] \quad \text{mit } \omega_{fi} = \omega_f - \omega_i . \quad (3.12)$$

Dabei ist

$$e x_{fi} = e \langle \psi_f | \widehat{x} | \psi_i \rangle = e \int \psi_f^*(\mathbf{r}) x \psi_i(\mathbf{r}) d^3r \quad (3.13)$$

das Übergangs-Matrixelement des elektrischen Dipolmoments. Die Integration über das Zeitintervall  $0 < t < T$  ergibt

$$i\hbar c_f(T) = \frac{\mathcal{E}_0}{2} e x_{fi} \left[ \frac{e^{i(\omega_{fi} + \omega_\ell)T} - 1}{i(\omega_{fi} + \omega_\ell)} + \frac{e^{i(\omega_{fi} - \omega_\ell)T} - 1}{i(\omega_{fi} - \omega_\ell)} \right] . \quad (3.14)$$

Diese Gleichung beschreibt die Absorption von Strahlung für den Fall  $E_f > E_i$  und die stimulierten Emission für  $E_f < E_i$ .

### Absorption von Strahlung

Der Absorptionsprozess tritt auf, wenn die Energie der Endzustands höher als die des Anfangszustands ist

$$E_f > E_i \Rightarrow \omega_{fi} > 0 .$$

Der zweite Term in der eckigen Klammer von Gl. (3.14) hat einen Resonanznenner bei  $\omega_\ell = \omega_{fi}$  und dominiert bei dieser Frequenz. Die Wahrscheinlichkeit, das Elektron nach Abschalten der Wechselwirkung im Endzustand  $\psi_f$  zu finden, ist durch das Absolutquadrat des Koeffizienten  $c_f(T)$  gegeben

$$|c_f(T)|^2 = \frac{\mathcal{E}_0^2}{4\hbar^2} e^2 |x_{fi}|^2 \frac{|e^{i(\omega_{fi} - \omega_\ell)T} - 1|^2}{(\omega_{fi} - \omega_\ell)^2} = \frac{\pi e^2 \mathcal{E}_0^2}{2\hbar^2} S(\omega_\ell - \omega_{fi}) |x_{fi}|^2 T \quad (3.15)$$

mit der Funktion

$$S(\omega_\ell - \omega_{fi}) = \frac{\sin^2 [(\omega_\ell - \omega_{fi})T/2]}{(\omega_\ell - \omega_{fi})^2 \pi T/2} , \quad (3.16)$$

die für große  $T$  eine sehr schmale Kurve ist, deren Maximum bei  $\omega_\ell - \omega_{fi} = 0$  liegt (siehe Abb. 3.2). Für  $T \rightarrow \infty$  geht sie in die Deltafunktion  $\delta(\omega_\ell - \omega_{fi})$  über. Diese “Energieerhaltungs-Funktion” garantiert die Erhaltung der Energie beim Strahlungsprozess in Einklang mit der Unschärferelation:

$$\hbar\omega_\ell = |E_f - E_i| \pm \Delta E \quad \text{mit } \Delta E \leq \frac{\hbar}{T} . \quad (3.17)$$

Die Wahrscheinlichkeit  $|c_f(T)|^2$  ist proportional zur Zeitdauer  $T$  der Wechselwirkung. Dividiert man durch  $T$  und integriert über das schmale Frequenzband der Lichtwelle, so ergibt sich die Übergangswahrscheinlichkeit pro Zeiteinheit. Wir erhalten das wichtige Resultat:

$$w_{\text{abs}} = \frac{\pi e^2 \mathcal{E}_0^2}{2\hbar^2} |x_{fi}|^2 . \quad (3.18)$$

### Stimulierte Emission von Strahlung

Stimulierte Emission tritt auf, wenn die Energie der Endzustands niedriger als die des Anfangszustands ist

$$E_f < E_i \Rightarrow \omega_{fi} < 0 .$$

Der erste Term in der eckigen Klammer von Gl. (3.14) hat einen Resonanznenner bei  $\omega_\ell = -\omega_{fi} = |\omega_{fi}|$  und dominiert bei dieser Frequenz. Wiederum ist die Wahrscheinlichkeit, das Elektron nach Abschalten

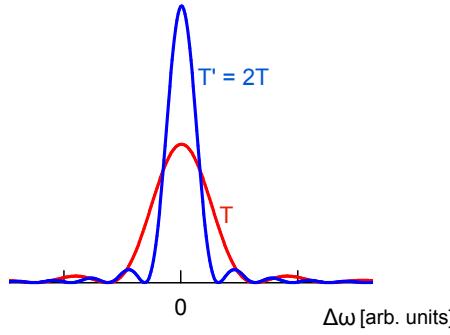


Abbildung 3.2: Die Energieerhaltungs-Funktion  $S(\omega_\ell - \omega_{fi})$ , aufgetragen gegen  $\Delta\omega = \omega_\ell - \omega_{fi}$  in willkürlichen Einheiten. Die Höhe der Kurve wächst linear mit  $T$  an, die Breite skaliert mit  $1/T$ ; für  $T' = 2T$  beispielsweise wird das Maximum doppelt so hoch, und die Breite halbiert sich. Im Limes  $T \rightarrow \infty$  strebt  $S(\omega_\ell - \omega_{fi})$  gegen die Deltafunktion  $\delta(\omega_\ell - \omega_{fi})$ .

der Wechselwirkung im Endzustand  $\psi_f$  zu finden, durch das Absolutquadrat des Koeffizienten  $c_f(T)$  gegeben

$$|c_f(T)|^2 = \frac{\mathcal{E}_0^2}{4\hbar^2} e^2 |x_{fi}|^2 \frac{|e^{i(\omega_{fi} + \omega_\ell)T} - 1|^2}{(\omega_{fi} + \omega_\ell)^2} = \frac{\pi e^2 \mathcal{E}_0^2}{2\hbar^2} \frac{\sin^2 [(\omega_\ell - |\omega_{fi}|)T/2]}{(\omega_\ell - |\omega_{fi}|)^2 \pi T/2} |x_{fi}|^2 T \quad (3.19)$$

Wir erhalten das dasselbe Resultat wie in Gl. (3.18)

$$w_{\text{stim}} = \frac{\pi e^2 \mathcal{E}_0^2}{2\hbar^2} |x_{fi}|^2. \quad (3.20)$$

Die Wahrscheinlichkeiten für Absorption und stimuliertes Emission sind exakt gleich, und beide sind proportional zum Absolutquadrat des Matrixelements des elektrischen Dipolmoments und zum Quadrat der elektrischen Feldstärke.

Wie schon erwähnt, gibt es keine spontane Emission in der Quantenmechanik.

### 3.2 Absorption und Emission in der Quantenfeldtheorie

Die quantenfeldtheoretische Behandlung der Absorption oder Emission von Licht beim Übergang eines atomaren Elektrons von einem Energieniveau auf ein anderes Niveau erfordert im Prinzip die Lösung der Dirac-Gleichung. Da die Elektronen in den äußeren Schalen der Atome nichtrelativistisch sind, kann man in guter Näherung mit der Schrödinger-Gleichung in Kombination mit der zeitabhängigen Störungstheorie arbeiten. Die wesentliche Neuerung im Vergleich zum vorhergehenden Abschnitt ist, dass die Lichtwelle nicht mehr als klassische Welle angesetzt wird, sondern dass das quantisierte elektromagnetische Feld verwendet wird.

Zur Vereinfachung nehmen wir wieder an, dass sich das Atom in einem monochromatischen Lichtwellenfeld befindet, dessen Frequenz so gewählt wird, dass in sehr guter Näherung  $\hbar\omega_\ell = |E_f - E_i|$  ist. Die Wellenfunktionen des ungestörten Atoms erfüllen die zeitunabhängige Schrödinger-Gleichung

$$\hat{H}_0 \psi_i = E_i \psi_i, \quad \hat{H}_0 \psi_f = E_f \psi_f \quad \text{mit} \quad \hat{H}_0 = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m_e} + V(r) \quad (3.21)$$

Um im Hamiltonformalismus die Kopplung zwischen dem Elektron und dem elektromagnetischen Feld zu erfassen, ersetzt man Impuls  $\mathbf{p} = m_e \mathbf{v}$  des Elektrons durch den kanonischen Impuls  $\mathbf{p} + e\mathbf{A}$ . Die Hamiltonfunktion des Atoms im Strahlungsfeld lautet

$$H_1 = \frac{(\mathbf{p} + e\mathbf{A})^2}{2m_e} + V(r) = \frac{1}{2m_e} (\mathbf{p}^2 + \mathbf{p} \cdot \mathbf{A} + \mathbf{A} \cdot \mathbf{p} + e^2 \mathbf{A}^2) + V(r) \approx \frac{\mathbf{p}^2}{2m_e} + \frac{e}{2m_e} (\mathbf{p} \cdot \mathbf{A} + \mathbf{A} \cdot \mathbf{p}) + V(r).$$

Der Term  $e^2 \mathbf{A}^2 / (2m_e)$  ist normalerweise in der Atomphysik vernachlässigbar und wird hier weggelassen (dieser Term ist für Zwei-Photon-Emission verantwortlich). Bevor man den Übergang zur Quantentheorie macht, ist es sinnvoll, das Skalarprodukt von Impuls und Vektorpotential umschreiben<sup>1</sup>:

$$\mathbf{p} \cdot \mathbf{A} = m_e \mathbf{v} \cdot \mathbf{A}.$$

Der Hamiltonoperator des Atoms im Strahlungsfeld wird damit

$$\hat{H}_1 = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m_e} + V(r) + e \hat{\mathbf{v}} \cdot \hat{\mathbf{A}} = \hat{H}_0 + e \hat{\mathbf{v}} \cdot \hat{\mathbf{A}} = \hat{H}_0 + \hat{W}. \quad (3.22)$$

Zu beachten ist, dass die Operatoren  $\hat{\mathbf{p}}$  und  $\hat{\mathbf{v}}$  nur auf die Wellenfunktion  $\psi$  des Elektrons wirken, während der Operator  $\hat{\mathbf{A}}$  nur auf die Quantenzustände des Photonenfeldes wirkt. Aus diesem Grund sind  $\hat{\mathbf{v}}$  und  $\hat{\mathbf{A}}$  vertauschbar.

Wie schon gesagt betrachten wir den Spezialfall, dass nur eine einzige Welle vorhanden ist, beschrieben durch den Operator des Vektorpotentials

$$\hat{A}_x(z, t) = \frac{1}{\sqrt{\epsilon_0 L^3}} \left[ \hat{Q} \cos(kz) - \frac{1}{\omega_\ell} \hat{P} \sin(kz) \right]. \quad (3.23)$$

Dann ist  $\hat{\mathbf{v}} \cdot \hat{\mathbf{A}} = \hat{v} \hat{A}$ , wobei wir zur Vereinfachung der Schreibweise den Index  $x$  bei  $\hat{v}_x$  und  $\hat{A}_x$  weglassen. Das Atom befindet sich am Ort  $\mathbf{r} = 0$ . Die Wellenlänge des Lichtes ist im allgemeinen sehr groß gegen den Atomdurchmesser, daher gilt innerhalb des Atoms  $kz \ll 1$ , also  $\cos(kz) \approx 1$  und  $\sin(kz) \approx 0$ . Damit wird der Operator des Vektorpotentials

$$\hat{A} = \frac{1}{\sqrt{\epsilon_0 L^3}} \hat{Q} = \frac{1}{\sqrt{\epsilon_0 L^3}} \sqrt{\frac{\hbar}{2\omega_\ell}} (\hat{C}^+ + \hat{C}^-). \quad (3.24)$$

Der Wechselwirkungsterm hat die einfache Gestalt

$$\hat{W} = e \hat{\mathbf{v}} \cdot \hat{\mathbf{A}} = e \sqrt{\frac{\hbar}{2\omega_\ell \epsilon_0 L^3}} \hat{v} (\hat{C}^+ + \hat{C}^-). \quad (3.25)$$

Der Hamiltonoperator der Lichtwelle hat die Form (2.14)

$$\hat{H}_2 = \frac{1}{2} (\hat{P}^2 + \omega_\ell^2 \hat{Q}^2). \quad (3.26)$$

Seine Eigenzustände schreiben wir als Dirac-Ket-Vektoren

$$\hat{H}_2 |n\rangle = (n + 1/2) \hbar\omega_\ell |n\rangle.$$

Der Hamiltonoperator des Gesamtsystems ist die Summe der Hamiltonoperatoren des Atoms und der Lichtwelle

$$\hat{H} = \hat{H}_1 + \hat{H}_2 = \hat{H}_0 + \hat{H}_2 + \hat{W}, \quad (3.27)$$

und die gesamte Zustandsfunktion ist das Produkt der Wellenfunktion des Elektrons und des Dirac-Kets der Lichtwelle. Anfangs- und Endzustand schreiben wir in der Form

$$\Phi_i = \psi_i |n_i\rangle, \quad \Phi_f = \psi_f |n_f\rangle. \quad (3.28)$$

Ohne den Wechselwirkungsterm gilt

$$\hat{H} \Phi_i = (\hat{H}_0 \psi_i) |n_i\rangle + \psi_i (\hat{H}_2 |n_i\rangle) = [E_i + \hbar\omega_\ell (n_i + 1/2)] \Phi_i,$$

<sup>1</sup>In der klassischen Elektrodynamik kann man die magnetische Energiedichte als Skalarprodukt der elektrischen Stromdichte und des Vektorpotentials umzuschreiben:  $\mathbf{J} \cdot \mathbf{A} = \rho \mathbf{v} \cdot \mathbf{A}$ . Die Skalarprodukte  $\mathbf{p} \cdot \mathbf{A}$  und  $m_e \mathbf{v} \cdot \mathbf{A}$  bedeuten in der klassischen Physik dasselbe, aber nach Substitution der Operatoren ergeben sich verschiedene Resultate:  $m_e \hat{\mathbf{v}} \cdot \hat{\mathbf{A}}$  ist die korrekte Form der Kopplung in der Quantenfeldtheorie. Dies ist ein Beispiel dafür, dass der Klassik-Quanten-Übergang seine Tücken hat.

und analog für  $\Phi_f$ . Beide Zustände sind stationär für  $\widehat{W} = 0$ , es gibt weder Emission noch Absorption. Wenn man jedoch die Wechselwirkung einschaltet ( $\widehat{W} \neq 0$ ), sind diese Zustände nicht mehr stationär. Selbst der Grundzustand  $|0\rangle$  des Lichtwellenfeldes erweist sich als nichtstationär, wenn er mit der Wellenfunktion eines angeregten Atoms kombiniert wird. Genau hier liegt die Quelle der spontanen Abstrahlung.

Jetzt wird der Übergang  $\Phi_i \rightarrow \Phi_f$  betrachtet. Die Übergangswahrscheinlichkeit pro Zeiteinheit ist proportional zum Absolutquadrat des Übergangsmatrixelements des Wechselwirkungsoperators  $\widehat{W}$ :

$$w_{(i \rightarrow f)} \propto |\langle \Phi_f | \widehat{W} | \Phi_i \rangle|^2.$$

Das Übergangsmatrixelement kann man als Produkt von zwei Matrixelementen schreiben

$$\langle \Phi_f | \widehat{W} | \Phi_i \rangle = \sqrt{\frac{e^2 \hbar}{2 \omega_\ell \epsilon_0 L^3}} \langle \psi_f | \widehat{v} | \psi_i \rangle \cdot \left( \langle n_f | \widehat{C}^+ | n_i \rangle + \langle n_f | \widehat{C}^- | n_i \rangle \right). \quad (3.29)$$

Das erste Matrixelement betrifft den atomaren Übergang  $\psi_i \rightarrow \psi_f$ . Das hier auftretende Matrixelement des Geschwindigkeitsoperators ist gleich der zeitlichen Ableitung des Matrixelements des Ortsoperators:

$$\langle \psi_f | \widehat{v} | \psi_i \rangle = \frac{d}{dt} \langle \psi_f | \widehat{x} | \psi_i \rangle = \frac{d x_{fi}}{dt}. \quad (3.30)$$

Aus  $\psi_i \propto \exp(-i \omega_i t)$  und  $\psi_f^* \propto \exp(+i \omega_f t)$  folgt

$$\langle \psi_f | \widehat{v} | \psi_i \rangle = i (\omega_f - \omega_i) \langle \psi_f | \widehat{x} | \psi_i \rangle = i \omega_{fi} x_{fi}. \quad (3.31)$$

Damit das Dipolmatrixelement  $e x_{fi}$  von null verschieden ist, müssen die bekannten Auswahlregeln der Atomphysik  $\Delta \ell = \pm 1$  und  $\Delta m_\ell = 0, \pm 1$  erfüllt sein. Darauf wollen wir hier nicht weiter eingehen. Wichtig für unsere jetzige Diskussion ist das zweite Matrixelement. Nach Gl. (2.17) gilt

$$\widehat{C}^+ | n_i \rangle = \sqrt{n_i + 1} | n_i + 1 \rangle, \quad \widehat{C}^- | n_i \rangle = \sqrt{n_i} | n_i - 1 \rangle.$$

Das zweite Übergangsmatrixelement ist also genau dann von null verschieden, wenn  $n_f = n_i + 1$  oder  $n_f = n_i - 1$  ist. Das bedeutet, dass nur solche Prozesse auftreten, bei denen genau ein Photon erzeugt wird ( $n_f = n_i + 1$ ) oder vernichtet wird ( $n_f = n_i - 1$ ).

Zur Berechnung der Übergangswahrscheinlichkeit gehen wir auf Gl. (3.11) zurück:

$$i \hbar \dot{c}_f = c_i(0) \langle \Phi_f | \widehat{W} | \Phi_i \rangle = \langle \Phi_f | \widehat{W} | \Phi_i \rangle. \quad (3.32)$$

Die Integration über das Zeitintervall  $0 < t < T$  der Wechselwirkung ergibt

$$i \hbar c_f(T) = i \sqrt{\frac{e^2 \hbar}{2 \omega_\ell \epsilon_0 L^3}} \omega_{fi} x_{fi} \left[ \underbrace{\sqrt{n_i + 1} \cdot \frac{e^{i(\omega_{fi} + \omega_\ell)T} - 1}{i(\omega_{fi} + \omega_\ell)}}_{\text{Emission}} + \underbrace{\sqrt{n_i} \cdot \frac{e^{i(\omega_{fi} - \omega_\ell)T} - 1}{i(\omega_{fi} - \omega_\ell)}}_{\text{Absorption}} \right]. \quad (3.33)$$

### Absorption von Strahlung

Wenn das Energieniveau  $E_f$  des Atoms höher liegt als  $E_i$ , kann der Übergang  $\psi_i \rightarrow \psi_f$  durch Absorption eines Photons der Energie  $\hbar \omega = E_f - E_i$  erfolgen. Die Wahrscheinlichkeit, das Elektron nach Abschalten der Wechselwirkung im Endzustand  $\psi_f$  zu finden, ist durch das Absolutquadrat des Koeffizienten  $c_f(T)$  gegeben

$$|c_f(T)|^2 = \frac{e^2}{2 \hbar \omega_\ell \epsilon_0 L^3} \omega_{fi}^2 |x_{fi}|^2 \frac{|e^{i(\omega_{fi} - \omega_\ell)T} - 1|^2}{(\omega_{fi} - \omega_\ell)^2} \cdot n_i = \frac{\pi e^2 \omega_{fi}^2}{\hbar \omega_\ell \epsilon_0 L^3} S(\omega_\ell - \omega_{fi}) |x_{fi}|^2 T \cdot n_i. \quad (3.34)$$

Dividiert man durch  $T$  und integriert über das schmale Frequenzband der Lichtwelle, so ergibt sich wegen  $\omega_{fi} \approx \omega_\ell$  für die Übergangswahrscheinlichkeit pro Zeiteinheit:

$$w_{\text{abs}} = \frac{\pi e^2 \omega_\ell}{\hbar \epsilon_0 L^3} |x_{fi}|^2 \cdot n_i. \quad (3.35)$$

In dieser Gleichung bedeutet  $n_i$  die Anzahl der Photonen im Volumen  $L^3$ . Die Energiedichte der elektromagnetischen Welle ist demnach

$$\frac{n_i \hbar \omega_\ell}{L^3} \equiv \frac{\epsilon_0}{2} \mathcal{E}_0^2 \Rightarrow n_i = \frac{\epsilon_0 \mathcal{E}_0^2 L^3}{2 \hbar \omega_\ell}. \quad (3.36)$$

Setzt man dies in Gl. (3.35) ein, so erhält man

$$w_{\text{abs}} = \frac{\pi e^2 \mathcal{E}_0^2}{2 \hbar^2} |x_{fi}|^2, \quad (3.37)$$

in perfekter Übereinstimmung mit der quantenmechanischen Formel (3.18).

### Emission von Strahlung

Wenn  $E_f < E_i$  ist, kann der Übergang  $\psi_i \rightarrow \psi_f$  durch Emission eines Photons der Energie  $\hbar \omega = E_i - E_f$  erfolgen. Für das Photonenfeld bedeutet dies die Erzeugung eines Photons. Das Matrixelement des Störoperators lautet in diesem Fall

$$\langle \Phi_f | \hat{W} | \Phi_i \rangle = \sqrt{\frac{e^2 \hbar}{2 \omega \epsilon_0 L^3}} i \omega_{fi} x_{fi} \cdot \sqrt{n_i + 1} \quad \text{bei Emission von Strahlung.} \quad (3.38)$$

Die Emission ist wird ähnlich wie die Absorption berechnet, und man findet in Analogie zu Formel (3.35)

$$w_{\text{em}} = \frac{\pi e^2 \omega_\ell}{\hbar \epsilon_0 L^3} |x_{fi}|^2 \cdot (n_i + 1) = \underbrace{\frac{\pi e^2 \omega_\ell}{\hbar \epsilon_0 L^3} |x_{fi}|^2 \cdot n_i}_{\text{stim. Em.}} + \underbrace{\frac{\pi e^2 \omega_\ell}{\hbar \epsilon_0 L^3} |x_{fi}|^2 \cdot 1}_{\text{spont. Em.}}. \quad (3.39)$$

Der erste Summand ergibt genau die Formel (3.20). Das bedeutet: die quantenfeldtheoretischen Resultate stimmen mit den quantenmechanischen überein, und auch in der Quantenfeldtheorie erweisen sich die Wahrscheinlichkeiten für Absorption und stimulierte Emission als exakt gleich.

Es gibt in Gl. (3.39) den wichtigen Zusatzterm  $\pi e^2 \omega_\ell / (\hbar \epsilon_0 L^3) |x_{fi}|^2 \cdot 1$ , welcher die spontane Emission beschreibt. Jetzt kommt ein spannendes Ergebnis. Im Anfangszustand sei überhaupt kein Photon vorhanden, also  $n_i = 0$ . Wenn ein elektromagnetisches Feld kein Photon enthält, verschwindet die Energiedichte und damit auch die elektrische Feldstärke, und dann ist die Emission von Strahlung in der Quantenmechanik ausgeschlossen. Die Gleichung (3.39) zeigt uns aber, dass in der Quantenfeldtheorie dann immer noch Emission auftreten kann. Dies ist die spontane Emission, die "von selbst", ohne äußeres Feld, abläuft. Die Wahrscheinlichkeit für spontane Emission wird

$$w_{\text{spon}} \propto |\langle \psi_f | \hat{x} | \psi_i \rangle|^2 |\langle 1 | \hat{C}^+ | 0 \rangle|^2 = |x_{fi}|^2 \cdot 1. \quad (3.40)$$

Der Faktor  $|\langle 1 | \hat{C}^+ | 0 \rangle|^2$  beschreibt die Erzeugung eines Photons aus dem Vakuum.

### Charakteristische Eigenschaften der stimulierten Emission

Damit die Emission eines Photons als stimuliert im Sinn der Quantenfeldtheorie genannt werden darf, müssen 2 Kriterien erfüllt sein:

**Kriterium I** Die Wahrscheinlichkeit für stimulierte Emission ist proportional zur Zahl  $n_i$  der bereits vorhandenen Photonen in diesem Quantenzustand.

**Kriterium II** Das emittierte Photon nimmt den gleichen Quantenzustand ein wie die Photonen der anregenden Welle: es hat exakt die gleiche Frequenz, die gleiche Richtung, die gleiche Polarisation und die gleiche Phase. Diese perfekte Identität ist eine Konsequenz der Bose-Einstein-Statistik.

### 3.3 Feldtheoretische Berechnung der spontanen Emission

Zur Berechnung der Wahrscheinlichkeit für spontane Emission wird eine bekannte Formel der zeitabhängigen Störungsrechnung benutzt, die von Enrico Fermi wegen ihrer zentralen Bedeutung die “Goldene Regel” genannt wurde. Die Wahrscheinlichkeit pro Zeiteinheit für einen spontanen Übergang  $\Phi_i \rightarrow \Phi_f$  ist

$$w_{\text{spon}} = \frac{2\pi}{\hbar} |W_{fi}|^2 \rho(E_f). \quad (3.41)$$

Hierin ist  $W_{fi}$  das in Gl. (3.38) aufgeführte Übergangsmatrixelement des Störoperators  $\widehat{W}$ , und  $\rho(E_f)$  ist die Dichte der Endzustände gemäss Formel (2.6). Durch Einsetzen dieser Gleichungen erhält man

$$w_{\text{spon}} = \frac{e^2}{\pi \epsilon_0 \hbar c^3} |x_{fi}|^2 |\omega_{fi}|^3. \quad (3.42)$$

Die spontane Emission erfolgt isotrop in alle Raumrichtungen. Daher gilt

$$|x_{fi}|^2 = |y_{fi}|^2 = |z_{fi}|^2 = \frac{|r_{fi}|^2}{3},$$

und es folgt die aus der Literatur bekannte Formel für die Wahrscheinlichkeit der spontanen Emission

$$w_{\text{spon}} = \frac{e^2}{3 \pi \epsilon_0 \hbar c^3} |r_{fi}|^2 \omega^3 \quad \text{mit} \quad \omega = \frac{E_i - E_f}{\hbar}, \quad (3.43)$$

die für einen Dipolübergang eines Atoms von einem Anfangsniveau  $E_i$  auf ein Endniveau  $E_f < E_i$  gilt.

Die Gleichung (3.43) ist außerordentlich wichtig. Sie zeigt, dass die spontane Emission nur von den spezifischen Eigenschaften des betrachteten Atoms abhängt, dem Dipol-Matrixelement  $e r_{fi}$  und der Energiedifferenz  $E_i - E_f$ . Es gibt keinerlei Abhängigkeiten von externen Parametern, die vom Experimentator variiert werden könnten, wie z.B. Magnetfeld, Temperatur, Druck etc. Das bedeutet, dass die spontane Emission nicht von außen beeinflusst oder kontrolliert werden kann (ausgenommen in sehr speziellen Versuchsanordnungen, die im nächsten Abschnitt diskutiert werden). Dadurch unterscheidet sich die spontane Emission in fundamentaler Weise von der stimulierten Emission.

Ein wichtiges Charakteristikum ist die  $\omega^3$ -Abhängigkeit: die spontane Emission hat eine verschwindend kleine Wahrscheinlichkeit bei niedrigen Frequenzen, sie wird aber sehr wichtig bei hohen Frequenzen.

### 3.4 Beziehungen zwischen stimulierter und spontaner Emission

#### 3.4.1 Nur eine Schwingungsmodus

In Kap. 3.2 haben wir den Spezialfall betrachtet, dass nur eine Schwingungsmodus des elektromagnetischen Feldes vorliegt. Wenn es bereits  $n$  Photonen im Strahlungsfeld gibt, ist die stimulierte Emission  $n$ -mal wahrscheinlicher als die spontane Emission:

$$w_{\text{stim}} = n w_{\text{spon}} \quad (\text{nur eine Mode}). \quad (3.44)$$

Diese Beziehung ist für die Funktion des Lasers von entscheidender Bedeutung, aber in allen Lasern tritt als Konkurrenzprozess zur stimulierten Emission auch die spontane Emission auf. Die Gleichung (3.44) gilt dann nur für die spezielle Schwingungsmodus, die zum Laserübergang führt. Sie gilt nicht für die anderen Schwingungsmoden.

#### 3.4.2 Strahlung im thermischen Gleichgewicht mit Materie

Von Albert Einstein wurde schon im Jahr 1917, lange vor Entstehung der Quantenmechanik, ein Zusammenhang zwischen Emissions- und Absorptionsvorgängen im thermodynamischen Gleichgewicht gefunden. Um konsistente Resultate zu erhalten, musste Einstein dabei den Prozess der stimulierten (induzierten) Emission “erfinden”, der zu dieser Zeit unbekannt war. Wir betrachten elektromagnetische Strahlung im thermodynamischen Gleichgewicht mit erhitzter Materie der absoluten Temperatur  $T$  (Beisp. Sonne,

das Innere eines Hochofens, näherungsweise eine Glühlampe). Es wird dann ein kontinuierliches Frequenzspektrum emittiert, dessen spektrale Energiedichte durch die Plancksche Strahlungsformel (4.10) gegeben ist. Die Photonen können beliebige Frequenzen, Richtungen und Polarisation haben. Es gibt daher außerordentlich viele verschiedene Zustände für die Photonen. Nehmen wir an, wir hätten Atome mit zwei Niveaus  $E_1$  und  $E_2$ , die sich zusammen mit der Strahlung in einem Kasten befinden. Die Wahrscheinlichkeit pro Zeiteinheit für Absorption  $E_1 \rightarrow E_2$  ist proportional zur Energiedichte  $\rho_{\text{th}}(\omega)$  der Strahlung bei der Frequenz  $\omega = (E_2 - E_1)/\hbar$

$$w_{\text{abs}} = B_{12} \rho_{\text{th}}(\omega) . \quad (3.45)$$

Die Emission hat zwei Anteile: die stimulierte Emission ist proportional zu  $\rho_{\text{th}}(\omega)$ , die spontane Emission ist unabhängig von der vorhandenen Strahlungsdichte

$$w_{\text{em}} = w_{\text{stim}} + w_{\text{spon}} = B_{21} \rho_{\text{th}}(\omega) + A_{21} . \quad (3.46)$$

Die Zahl  $N_2$  der Atome im oberen Niveau erhöht sich durch Absorption und vermindert sich durch Emission von Photonen:

$$\frac{dN_2}{dt} = w_{\text{abs}} N_1 - w_{\text{em}} N_2 = B_{12} \rho_{\text{th}}(\omega) N_1 - (B_{21} \rho_{\text{th}}(\omega) + A_{21}) N_2 . \quad (3.47)$$

Im thermodynamischen Gleichgewicht ist  $dN_2/dt = 0$ , und gemäß der Boltzmannverteilung gilt

$$\frac{N_1}{N_2} = \exp\left(\frac{E_2 - E_1}{k_B T}\right) = \exp\left(\frac{\hbar\omega}{k_B T}\right) . \quad (3.48)$$

Setzen wir dies in (3.47) ein, so folgt  $B_{12} \rho_{\text{th}}(\omega) \exp[\hbar\omega/(k_B T)] = A_{21} + B_{21} \rho_{\text{th}}(\omega)$  und daher

$$\rho_{\text{th}}(\omega) = \frac{A_{21}/B_{12}}{\exp[\hbar\omega/(k_B T)] - B_{21}/B_{12}} . \quad (3.49)$$

Durch Vergleich mit der Planck-Strahlungsformel (4.10) finden wir:

$$B_{21} = B_{12} \quad \text{und} \quad A_{21} = \frac{\hbar\omega^3}{\pi^2 c^3} B_{21} . \quad (3.50)$$

Die erste Gleichung besagt, dass die Wahrscheinlichkeiten für Absorption und stimulierte Emission gleich sind. Wie wir wissen, folgt dies auch aus der quantentheoretischen Behandlung. Die zweite Gleichung stellt einen Zusammenhang zwischen der stimulierten und spontanen Emission im thermodynamischen Gleichgewicht her:

$$\frac{w_{\text{stim}}}{w_{\text{spon}}} = \frac{B_{21} \rho_{\text{th}}(\omega)}{A_{21}} = \frac{1}{\exp[\hbar\omega/(k_B T)] - 1} . \quad (3.51)$$

Die Lichtwellen im Kasten werden durch optische Eigenschwingungen dargestellt. Jede Eigenschwingung verhält sich wie ein harmonischer Oszillator, dessen Energie den Wert  $(n + 1/2)\hbar\omega$  hat, wobei  $n$  die Zahl der Photonen in dieser Eigenschwingung ist. Im thermodynamischen Gleichgewicht ist die mittlere Zahl dieser Photonen

$$\bar{n} = \frac{1}{\exp[\hbar\omega/(k_B T)] - 1} , \quad (3.52)$$

und die mittlere Energie eines harmonischen Oszillators (abzüglich der Nullpunktsenergie  $\hbar\omega/2$ ) ist

$$\bar{E} = \frac{\hbar\omega}{\exp[\hbar\omega/(k_B T)] - 1} \equiv \bar{n} \hbar\omega . \quad (3.53)$$

Damit können wir schreiben

$$w_{\text{stim}} = \bar{n} w_{\text{spon}} . \quad (3.54)$$

Zwei Fälle sollen betrachtet werden.

**(a) Hohe Frequenzen:**  $\hbar\omega \gg k_B T$  bei Raumtemperatur,  $T = 293$  K. Dies gilt für sichtbares Licht und Röntgen- oder  $\gamma$ -Strahlung. Die mittlere Zahl der Photonen in einem definierten Quantenzustand ist im thermodynamischen Gleichgewicht sehr klein,  $\bar{n} \ll 1$ . Die spontane Emission ist viel wahrscheinlicher als die stimulierten Emissionen, was auch sofort aus Gl. (3.51) folgt.

Der Laser ist ein Gegenbeispiel, dort ist die Besetzungszahl eines bestimmten Photonzustands sehr groß gegen 1. Man muss sich aber klarmachen, dass der Laser ein System darstellt, welches extrem weit vom thermodynamischen Gleichgewicht entfernt ist, da eine Besetzungsinversion vorliegt. Die Gleichungen (3.52) und (3.54) dürfen daher nicht auf Laser angewandt werden.

**(b) Niedrige Frequenzen,**  $\hbar\omega \ll k_B T$ . Das gilt im Hochfrequenz- und Mikrowellenbereich. Dann ist  $\bar{n} \gg 1$ , und die stimulierten Emissionen dominieren völlig. Ein wichtiges Beispiel mit praktischer Bedeutung ist die magnetische Kernresonanz, die genaueste Methode zur Messung von Magnetfeldern und die Grundlage der Kernspin-Tomographie. Ein Proton hat in einem Magnetfeld  $B$  zwei Energieniveaus  $E_1 = -\mu B$  und  $E_2 = +\mu B$ . Durch Einstrahlen von Hochfrequenz mit  $\hbar\omega = 2\mu B$  kann man Umklappen der Spins erreichen. Für  $B = 1$  Tesla erhält man eine Frequenz  $f = \omega/(2\pi) = 42,6$  MHz. Bei Raumtemperatur ist  $\hbar\omega/(k_B T) \approx 10^{-5}$ , d.h. die spontane Emission ist im Vergleich zur stimulierten Emission völlig vernachlässigbar.

Für die beiden diskutierten Fälle gilt die Beziehung

$$w_{\text{stim}} = \frac{\pi^2 c^2 I(\omega)}{\hbar\omega^3} w_{\text{spon}}, \quad (3.55)$$

wobei  $I(\omega)$  die spektrale Intensität der einfallenden Strahlung ist. Der Beweis ist eine lehrreiche Übungsaufgabe. Die Formel (3.55) gilt allgemein, wenn die Strahlung isotrop und unpolarisiert ist, siehe Ref. [3], Gl. (44.10).

### 3.5 Strahlung einer periodisch schwingenden Ladung

#### Larmor-Formel

Ein Teilchen der Masse  $m$  und Ladung  $q$  führt eine harmonische Schwingung aus

$$x(t) = x_0 \cos(\omega t).$$

Wodurch diese Schwingung verursacht wird, soll zunächst ignoriert werden. Die Geschwindigkeit und Beschleunigung sind

$$v(t) = -\omega x_0 \sin(\omega t), \quad a(t) = -\omega^2 x_0 \cos(\omega t) \equiv a_0 \cos(\omega t). \quad (3.56)$$

Die klassische Schwingungsenergie ist

$$E_{\text{klass}} = \frac{m}{2} x_0^2 = \frac{m}{2\omega^2} a_0^2. \quad (3.57)$$

Das elektrische Dipolmoment der Ladung ist

$$\mathbf{p}(t) = q x(t) \mathbf{e}_x. \quad (3.58)$$

Die beschleunigte Ladung strahlt eine elektromagnetische Welle der Frequenz  $\omega$  aus. Die abgestrahlte Intensität hängt vom Winkel  $\theta$  zwischen dem Dipolmoment  $\mathbf{p}$  und dem Wellenvektor  $\mathbf{k}$  ab,  $I(\theta) \propto \sin^2 \theta$ . Nach Integration über den Raumwinkel findet man für die gesamte Strahlungsleistung

$$P_{\text{klass}} = \frac{q^2 a^2}{6\pi\epsilon_0 c^3}. \quad (3.59)$$

Hierin ist  $a^2 = a_0^2/2$  der zeitliche Mittelwert des Quadrats der Beschleunigung. Gleichung (3.59) ist die Larmorformel der klassischen Elektrodynamik.

### Quantentheoretische Herleitung der Strahlungleistung

Jetzt wollen wir dies Problem mit der Quantentheorie behandeln. Die oszillierende Ladung ist ein harmonischer Oszillator mit den in Kap. 1 angegebenen Wellenfunktionen  $\psi_\nu$  und den Energiewerten  $E_\nu = (\nu + 1/2) \hbar \omega$  (die Quantenzahl des Oszillators wird hier mit  $\nu$  bezeichnet, um Verwechslungen mit der Photonenzahl  $n$  zu vermeiden). Um die Formel (3.59) quantentheoretisch herzuleiten, multiplizieren wir Gl. (3.42) mit  $\hbar \omega$ , denn die abgestrahlte Leistung ist das Produkt der Übergangswahrscheinlichkeit pro Zeiteinheit und der Photonenergie.

$$P_{\text{quan}} = w_{\text{spon}} \hbar \omega = \frac{e^2}{\pi \epsilon_0 c^3} |x_{fi}|^2 \omega^4.$$

Diese Formel ist noch nicht ganz korrekt, man muss die  $\sin^2 \theta$ -Abhängigkeit der abgestrahlten Intensität berücksichtigen. Der über den Raumwinkel gemittelte Wert von  $\sin^2 \theta$  ist  $\overline{\sin^2 \theta} = 1/3$ . Damit wird

$$P_{\text{quan}} = w_{\text{spon}} \hbar \omega = \frac{e^2}{3 \pi \epsilon_0 c^3} |x_{fi}|^2 \omega^4. \quad (3.60)$$

Die Abstrahlung eines Photons ist gekoppelt mit einem Übergang  $\psi_i = \psi_\nu \rightarrow \psi_f = \psi_{\nu-1}$ . Das Matrixelement für diesen Übergang ist nach Gl. (1.18)

$$x_{fi} = x_{\nu-1, \nu} = \sqrt{\frac{\nu \hbar \omega}{2 m \omega}}, \quad |x_{fi}|^2 = \frac{\nu \hbar \omega}{2 m \omega^2}. \quad (3.61)$$

Nun ist  $\nu \hbar \omega = E_\nu - \hbar \omega/2$  die Anregungsenergie des Anfangszustands  $\psi_i = \psi_\nu$ , die wir gleichsetzen müssen mit der klassischen Energie des Oszillators vor der Abstrahlung:

$$\nu \hbar \omega = E_{\text{klass}} = \frac{m a_0^2}{2 \omega^2} = \frac{m a^2}{\omega^2}.$$

Setzt man dies in (3.60) ein, so folgt

$$P_{\text{quan}} = P_{\text{klass}} = \frac{q^2 a^2}{6 \pi \epsilon_0 c^3}. \quad (3.62)$$

Das quantentheoretische Ergebnis stimmt perfekt mit dem klassischen überein. Bei Landau-Lifschitz [3] findet man den kryptischen Satz, dass diese Übereinstimmung ein Zufall sei.

### Dipolstrahlung als erzwungene Strahlung

Die obige Behandlung der Dipolstrahlung hat Tradition, man findet sie in Lehrbüchern der Quantenmechanik wie z.B. [6]. Sie beschreibt aber im Grunde nur die halbe Wahrheit. Die Ursache der Oszillation wird in dieser Modellrechnung ignoriert, und deswegen kann die Abstrahlung auch nur "spontan" sein, da in dem Modell keine anregenden Kräfte existieren. Nun ist völlig klar, dass eine periodische Anregung unverzichtbar ist. Eine Senderantenne kann nur dann Radiowellen emittieren, wenn ihr von einem Hochfrequenzverstärker permanent Leistung zugeführt wird. Es ist daher naheliegend zu fragen, ob die Dipolstrahlung auch einen Beitrag von der stimulierten Emission erhält. Die Antwort ist ja, aber wie groß dieser Beitrag ist, hängt von der Frequenz ab und auch von der Art, wie die Dipolschwingung angeregt wird.

Die Beziehung (3.55)

$$\frac{w_{\text{stim}}}{w_{\text{spon}}} = \frac{\pi^2 c^2 I(\omega)}{\hbar \omega^3} \quad (3.63)$$

zeigt, dass die stimulierte Emission im Bereich sehr hoher Frequenzen (sichtbares Licht, UV- oder Röntgenstrahlung) normalerweise stark unterdrückt ist, außer im FEL. Regen wir ein Elektron durch Laserlicht zu einer harmonischen Schwingung an, so ist die stimulierte Emission noch zusätzlich unterdrückt, weil die Abstrahlungscharakteristik eines Dipols völlig anders aussieht als die annähernd ebene Lichtwelle des Lasers.

Die stimulierte Emission dominiert bei niedrigen Frequenzen, sofern die spektrale Intensität  $I(\omega)$  der einfallenden Strahlung hinreichend groß ist. Das ist in Radio- oder Fernsehsendern generell der Fall. Eine

wesentliche Eigenschaft eines Radio- oder Fernsehers ist, dass makroskopische elektromagnetische Wellen ausgestrahlt werden, die eine hohe Intensität haben und nahezu monochromatisch sind. Dies erfordert eine feste Phasenkorrelation zwischen den ungeheuer vielen Photonen in der Welle. Jedes Photon muss also mit einer starren Phasenbeziehung relativ zum erregenden Feld emittiert werden. Mit dem Mechanismus der spontanen Emission ist das unmöglich. Ein Fernsehers basiert deswegen auf der stimulierten Emission.

Der Prototyp eines Hertzschen Dipols ist eine Stabantenne der Länge  $\lambda/2$ , in der ein periodischer Strom fließt

$$I(t) = I_0 \cos(\omega t).$$

Die Antenne sendet Kugelwellen aus, deren Amplitude mit  $\sin(\theta)$  moduliert ist. Der Strom  $I(t)$  wird nicht durch eine ebene Welle der Frequenz  $f = \omega/(2\pi)$ , sondern durch einen Hochfrequenzverstärker erzeugt. Man könnte sich vorstellen, dass an Stelle des HF-Verstärkers einlaufende Kugelwellen zur Anregung benutzt werden. Die für dieses Problem relevanten Photonen-Zustände sind daher nicht die in der Quantenfeldtheorie (QFT) verwendeten ebenen Wellen, sondern Kugelwellen. Eine in diesem Sinn konstruierte QFT könnte möglicherweise zu dem Ergebnis führen würde, dass die Emission eines Hertzschen Dipols stimuliert ist. Ich schlage dies nicht ernsthaft vor, es ist nur eine Gedankenspielerei.

### 3.6 Quantentheoretische Aspekte der Undulatorstrahlung

Die Elektronen der Energie  $W_e \gg m_e c^2$  durchlaufen den Undulator auf einer Wellenbahn. Ihre mittlere Geschwindigkeit in  $z$ -Richtung ist nach Ref. [9]

$$\bar{v}_z = \left( 1 - \frac{1}{2\gamma^2} \left( 1 + \frac{K^2}{2} \right) \right) c \equiv \beta c \quad \text{mit} \quad \gamma = \frac{W_e}{m_e c^2} = \frac{1}{\sqrt{1 - \beta^2}}, \quad \beta = v/c \quad (3.64)$$

und dem Undulatorparameter

$$K = \frac{eB_0}{m_e c k_u} = \frac{eB_0 \lambda_u}{2\pi m_e c}.$$

In einem mitbewegten Koordinatensystem  $(x', y', z')$ , das die Geschwindigkeit  $\bar{v}_z$  entlang der Undulatorachse hat, wird das statische periodische Magnetfeld des Undulators in ein oszillierendes elektromagnetisches Feld Lorentz-transformiert. Dieses Wechselfeld regt die Elektronen zu harmonischen transversalen Schwingungen an und bewirkt auf diese Weise die Emission von Dipolstrahlung, die wir in Kap. 3.5 quantentheoretisch berechnet haben. Die Strahlungsleistung im mitbewegten Koordinatensystem ist durch die Larmorformel (3.59) gegeben. In Ref. [9] wird die Beschleunigung des Elektrons auf seiner Wellenbahn berechnet. Die Strahlungsleistung lässt sich damit wie folgt schreiben

$$P' = \frac{e^2 c \gamma^2 K^2 k_u^2}{2\pi\epsilon_0 (1 + K^2/2)^2}. \quad (3.65)$$

Das Undulatorfeld im mitbewegten System ist  $B' = \gamma B_0$ , also zeigt Gl. (3.65), dass die abgestrahlte Leistung proportional zur Energiedichte  $B'^2/(2\mu_0)$  des elektromagnetischen Wechselfeldes ist

$$P' \propto \frac{B'^2}{2\mu_0} = \frac{n \hbar \omega'}{L^3}. \quad (3.66)$$

Die Emissionswahrscheinlichkeit ist proportional zur Zahl  $n$  der im Feld vorhandenen Photonen. Dies ist das Kriterium I der stimulierten Emission. Das Kriterium II ist jedoch nicht erfüllt, denn es besteht nur eine geringe Wahrscheinlichkeit, dass das Photon in den Quantenzustand der einlaufenden Welle, also genau in  $z$ -Richtung, emittiert wird. In den meisten Fällen wird es andere Richtungen haben.

Bei der Analyse der Undulatorstrahlung befinden wir uns in einer Zwittersituation. Wenn wir als gegeben hinnehmen, dass die Elektronen im mitbewegten Koordinatensystem wie harmonische Oszillatoren schwingen, und nicht fragen warum sie das tun, so können wir die Strahlungsleistung mit der Formel für spontane Emission berechnen, siehe Gl. (3.60). Aber wie ich schon in Kap. 3.5 gesagt habe, ist dies nur die halbe Wahrheit. Die Anregung der Oszillation im mitbewegten System ist ‘stimuliert’. Ohne

das Undulatorfeld würden die relativistischen Elektronen geradlinig durch das Vakuumrohr fliegen und könnten aus kinematischen Gründen (Energie/Impuls-Erhaltung) keine Strahlung emittieren.

Die Undulatorstrahlung ist also mittelbar ein erzwungener Prozess: die Wellenbahn wird den Elektronen durch das Feld des Undulators aufgezwungen, die nachfolgende Abstrahlung ist vorwiegend spontan (man müsste mal numerisch untersuchen, wie groß der Beitrag der stimulierten Emission ist). Durch Ändern der Feldstärke des Undulators können wir die Intensität der Strahlung in weiten Grenzen variieren.

### **Undulatorstrahlung als Bremsstrahlung im Magnetfeld des Undulators**

Man kann die Strahlung auch durch Bremsstrahlung der einlaufenden Elektronen am periodischen Magnetfeld des Undulatorfeldes erklären und sogar quantitativ berechnen, siehe die Pionierarbeit von John Madey *Stimulated Emission of Bremsstrahlung in a Periodic Magnetic Field* [10]. Die Reaktionsrate ist selbstverständlich proportional zum Quadrat des Magnetfeldes: dies ist ganz klar ein erzwungener Prozess. Die Abstrahlung erfolgt aber nicht nur in Vorwärtsrichtung, sondern auch unter endlichen Winkeln. Die emittierten Photonen nehmen also nicht alle den gleichen Quantenzustand ein, d.h. unser Kriterium II ist verletzt, die Emission muss als spontan eingestuft werden. Madey zeigt weiterhin, dass die FEL-Strahlung auf der stimulierten Emission beruht.

*Ich habe die Arbeit von Madey noch nicht genau studiert.*

Für die Erzeugung von Bremsstrahlung verwendet man üblicherweise Schwermetalle mit hoher Kernladung wie Blei oder Uran, da die Reaktionsrate proportional zu  $Z^2$  ist. Die Atomkerne übernehmen dabei einen Rückstoßimpuls. Ohne Rückstoßpartner wäre die Emission eines Photons durch ein relativistisches Elektron verboten, denn der Prozess  $e \rightarrow e + \gamma$  würde den Energie-Impuls-Erhaltungssatz verletzen. Als Rückstoßpartner kommen aber nicht nur einzelne Atomkerne in Frage, sondern auch Einkristalle wie Diamant. Wenn die Kristallachsen mit hoher Präzision relativ zum einlaufenden Elektronenstrahl einjustiert werden, so dass der Rückstoßimpuls mit einem reziproken Gittervektor übereinstimmt (anders ausgedrückt, wenn man sich in einem Laue-Reflex befindet), übernimmt der gesamte Kristall den Rückstoßimpuls. Mit dieser Methode sind in den 1960er Jahren bei DESY mit 6 GeV Elektronen linear polarisierte und nahezu monochromatische Gammastrahlen mit einer Energie von 3.4 GeV erzeugt worden, mit denen international beachtete Experimente zur Erzeugung von geladenen Mesonen durchgeführt wurden.

Die Bremsstrahlung im periodischen Magnetfeld eines Undulators hat vermutlich Ähnlichkeiten mit der Bremsstrahlung im periodischen Gitter eines Einkristalls. Darüber muss ich noch nachdenken.

## Kapitel 4

# Weitere Betrachtungen zur Quantenfeldtheorie

### 4.1 Die tiefere Ursache spontaner Quantenübergänge

Wir haben gesehen, dass ein angeregtes Atom auf zwei Weisen in den Grundzustand übergehen kann, durch stimuliert oder spontane Emission eines Photons. Die stimulierte Emission ist die Grundlage des Lasers und wird durch ein bereits vorhandenes Strahlungsfeld induziert. Dieses Strahlungsfeld kann vom Experimentator nach Belieben ein- und ausgeschaltet werden und auch in seiner Stärke variiert werden. Die spontane Emission hingegen läuft von selbst ab, aber was ist die Ursache dafür?

*Die spontane Emission ist eine durch Vakuumfluktuationen erzwungene Emission.*

Diese Einsicht habe ich aus dem Physics Today Artikel von Victor Weisskopf [2] gewonnen, und ich möchte einige Sätze aus diesem Artikel zitieren:

*According to equation 5 spontaneous emission appears as a forced emission caused by the zero-point oscillations of the electromagnetic field, which are always present, even in a space without any photons. This was the start of an interesting development in theoretical physics. After Einstein had put an end to the concept of aether, the field-free and matter-free vacuum was considered as a truly “empty space”. The introduction of quantum mechanics changed this situation and the vacuum gradually became “populated”. In quantum mechanics an oscillator cannot be exactly at its rest position except at the expense of an infinite momentum, according to Heisenberg’s uncertainty relation. The oscillatory nature of the radiation field therefore requires zero-point oscillations of the electromagnetic fields in the vacuum state, which is the state of lowest energy. The spontaneous emission process can be interpreted as a consequence of these oscillations.*

Im tiefsten Energiezustand des elektromagnetischen Feldes, dem “Vakuum”, sind keine *reellen Photonen* vorhanden, aber die Nullpunktsschwingungen existieren für alle zulässigen Werte von  $\omega$ . Die Energie-Zeit-Unschärferelation erlaubt einem Oszillator, für eine sehr kurze Zeit in einen Anregungszustand überzugehen und danach in den Grundzustand zurückzukehren. Die bei diesen kurzlebigen Prozessen auftretenden *virtuellen Photonen* sind es, die die angeregten Atome zu ihren “spontanen” Übergängen veranlassen. Die Vakuumfluktuationen sind statistischer Natur, und mit der hier aufgeführten Deutung wird die statistische Natur der quantenmechanischen Übergänge auf die statistischen Fluktuationen des “leeren Raums” zurückgeführt.

Wie kann man diese Vorhersagen der Quantenfeldtheorie experimentell beweisen? Die Idee ist, angeregte Atome in eine Art “Faraday-Käfig” zu sperren, der die Vakuumfluktuationen abschirmt, und dann zu überprüfen, ob die Atome länger als normal im Anregungszustand bleiben. Ein Experiment dieser Art ist von Serge Haroche und Mitarbeitern mit einem Cäsium-Atomstrahl durchgeführt worden. Als Abschirmung dienten zwei sehr ebene parallele Metallplatten oberhalb und unterhalb des Atomstrahls (Abb. 4.1), deren Abstand  $d = 1,1 \mu\text{m}$  kleiner als die halbe Wellenlänge der beim Übergang  $5d \rightarrow 6s$  emittierten Strahlung war ( $\lambda = 3,5 \mu\text{m}$ ). Eine elektromagnetische Welle der Wellenlänge  $\lambda = 3,5 \mu\text{m}$  kann sich im Raum zwischen den Platten ungehindert ausbreiten, sofern ihr elektrischer Vektor senkrecht auf den Platten steht. Ist aber der  $\mathbf{E}$ -Vektor parallel zu den Platten, so wird die Welle exponentiell abgeschwächt und dringt weniger als eine Wellenlänge in den Zwischenraum ein. Mit einem Detektor wurde die Zahl der angeregten Cs-Atome als Funktion des Winkels zwischen dem  $\mathbf{E}$ -Vektor und den Platten gemessen. Bei paralleler Ausrichtung ( $0^\circ, 180^\circ$ ) wurde eine hohe Zählrate gemessen, bei senkrechter Ausrichtung ( $90^\circ$ ) erreichte kein einziges angeregtes Atom den Detektor. Die Auswertung des Experi-

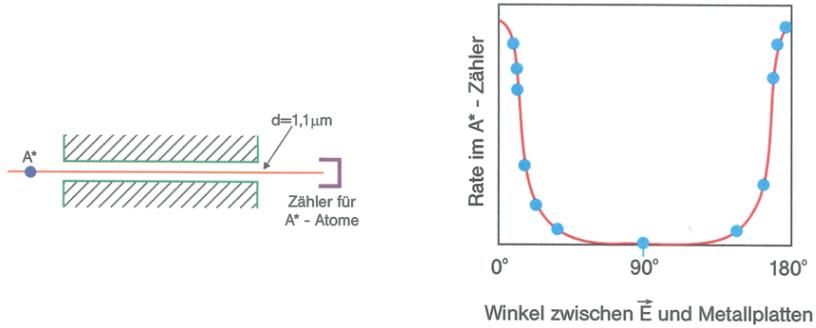


Abbildung 4.1: Unterdrückung der spontanen Emission durch “Abschirmung” der Vakuumfluktuationen. Links wird ein Schema des Experiments gezeigt, rechts ist die Zählrate der angeregten Cs-Atome  $A^*$  als Funktion des Winkels zwischen dem  $\mathbf{E}$ -Vektor und den Platten aufgetragen. Gezeichnet nach einer Skizze von S. Haroche mit freundlicher Genehmigung des Urhebers.

ments ergab, dass bei der parallelen Ausrichtung eine 13-fache Verlängerung der natürlichen Lebensdauer gemessen wurde.

Es sind auch Experimente mit angeregten Atomen in metallischen Hohlräumen (*cavities*) durchgeführt worden, die Vakuumfluktuationen jeglicher Polarisation abschirmten (siehe [7], [8]). Der spontane Zerfall konnte komplett zum Erliegen gebracht werden.

Diese experimentellen Befunde sind ganz offensichtlich in Widerspruch zu Formel (3.43). Diese Formel wird jedoch falsch, wenn man das Atom in einen metallischen Hohlraum einsperrt, dessen Dimensionen in der Größenordnung der Lichtwellenlänge liegen. Die periodischen Randbedingungen (2.2) werden außer Kraft gesetzt, wodurch sich die Zustandsdichte und die Emissionswahrscheinlichkeit drastisch verringern.

### Spontane Übergänge in der Kern- und Teilchenphysik

Es gibt viele weitere Typen spontaner Quantenübergänge, die ohne Einwirkung eines Experimentators ablaufen und die keiner Weise von außen beeinflusst werden können. Dazu zählen vor allem die radioaktiven Zerfälle von Atomkernen und instabilen Elementarteilchen. Beim  $\beta^-$ -Zerfall wandelt sich ein im Atomkern gebundenes Neutron in ein Proton, ein Elektron und ein Neutrino um. Dies ist der Prototyp eines spontanen Zerfalls. Man hat bis heute keine Möglichkeit gefunden und wird sie wahrscheinlich auch niemals finden, diesen Prozess zu stoppen oder zu beschleunigen. Diese Nichtkontrollierbarkeit führt zu schwerwiegenden Problemen. Die bei der Kernspaltung in einem Reaktor entstehenden Tochterkerne haben einen Neutronenüberschuss und sind alle radioaktiv. Es wäre außerordentlich nützlich, wenn man den langlebigen radioaktiven Müll durch geeignete Massnahmen zur schnellen Abstrahlung stimulieren und ihn dadurch unschädlich machen könnte.

Warum geht das prinzipiell nicht? Die Feldquanten der (geladenen) schwachen Wechselwirkung sind die  $W^+$ - und  $W^-$ -Bosonen mit Spin 1, die sich von den Photonen in zweierlei Hinsicht unterscheiden: (1) sie haben eine sehr hohe Ruhemasse von 90 Protonenmassen und (2) sie zerfallen mit extrem kurzer Lebendauer. Es erscheint völlig ausgeschlossen, ein dem optischen Laser analoges Gerät zu konstruieren mit einem kohärenten  $W$ -Bosonen-Strahl, der die radioaktiven Kerne zur Abregung stimuliert.

## 4.2 Das Problem der Nullpunktsenergien

Werden alle Wellen in Gl. (2.3) zugelassen, erhalten wir den Hamiltonoperator (2.19), dessen Energieniveaus durch folgende Formel beschrieben werden

$$E = \sum_{\mathbf{k}, s} \left( n_{\mathbf{k}} + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega_{\mathbf{k}} \quad n_{\mathbf{k}} = 0, 1, 2, \dots \quad (4.1)$$

Die Zahl  $n_{\mathbf{k}}$  gibt die Anzahl der Photonen mit Wellenzahlvektor  $\mathbf{k}$  an. Der Grundzustand des elektromagnetischen Feldes, auch *Vakuumzustand* genannt, liegt vor wenn alle  $n_{\mathbf{k}} = 0$  sind. Das Problem ist jedoch, dass jede Schwingungsmodus dann immer noch eine Nullpunktsenergie von  $\hbar\omega_{\mathbf{k}}/2$  hat. Da die  $m_i$  in Gl. (2.4) alle ganzen Zahlen durchlaufen können, gibt es unendlich viele  $\mathbf{k}$ -Vektoren, und sieht es so aus, als habe der Vakuumzustand eine unendlich große Nullpunktsenergie. Dies ist eine der Divergenzen der Quantenelektrodynamik, die zeigt, dass die Theorie noch nicht vollständig ist (s. Landau-Lifschitz).

W. Heitler argumentiert, dass die vermeintliche Unendlichkeit der Nullpunktsenergie des Vakuums formaler Natur sei. Er zeigt, dass der Übergang von der klassischen Theorie zur Quantentheorie nicht eindeutig ist. Die Hamiltonfunktion (2.13) kann auch durch die Feldamplituden  $a_{\mathbf{k}}$  und  $a_{\mathbf{k}}^*$  ausgedrückt werden, siehe Gl. (2.7).

$$H = \epsilon_0 L^3 \sum_{\mathbf{k}, s} \omega_{\mathbf{k}}^2 (a_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}}^* + a_{\mathbf{k}}^* a_{\mathbf{k}}) \quad (4.2)$$

Die Amplituden  $a_{\mathbf{k}}$  und  $a_{\mathbf{k}}^*$  sind komplexe Zahlen, die vertauschbar sind. Also darf man mit gleicher Berechtigung schreiben

$$H' = \epsilon_0 L^3 \sum_{\mathbf{k}, s} \omega_{\mathbf{k}}^2 2 a_{\mathbf{k}}^* a_{\mathbf{k}}, \quad (4.3)$$

und es gilt  $H' = H$ . Macht man den Übergang zur Quantentheorie, so ergeben  $H$  und  $H'$  jedoch verschiedene Hamiltonoperatoren

$$\hat{H} = \epsilon_0 L^3 \sum_{\mathbf{k}, s} \omega_{\mathbf{k}}^2 (\hat{a}_{\mathbf{k}} \hat{a}_{\mathbf{k}}^* + \hat{a}_{\mathbf{k}}^* \hat{a}_{\mathbf{k}}), \quad \hat{H}' = \epsilon_0 L^3 \sum_{\mathbf{k}, s} \omega_{\mathbf{k}}^2 2 \hat{a}_{\mathbf{k}}^* \hat{a}_{\mathbf{k}}. \quad (4.4)$$

Es gilt  $\hat{H}' \neq \hat{H}$ , weil die Operatoren  $\hat{a}_{\mathbf{k}}$  und  $\hat{a}_{\mathbf{k}}^*$  nicht vertauschbar sind. Rechnet man auf die Operatoren auf die  $\hat{Q}_{\mathbf{k}}$  und  $\hat{P}_{\mathbf{k}}$  um, so nimmt  $\hat{H}$  wie erwartet die Gestalt (2.19) an, aber  $\hat{H}'$  sieht anders aus:

$$\hat{H}' = \sum_{\mathbf{k}, s} \left[ \frac{1}{2} (\hat{P}_{\mathbf{k}}^2 + \omega^2 \hat{Q}_{\mathbf{k}}^2) - \frac{1}{2} \hbar \omega_{\mathbf{k}} \right]. \quad (4.5)$$

Dieser Hamiltonoperator hat die Eigenwerte

$$E = \sum_{\mathbf{k}, s} n_{\mathbf{k}} \hbar \omega_{\mathbf{k}} \quad n_{\mathbf{k}} = 0, 1, 2, \dots \quad (4.6)$$

Das Problem der unendlich großen Nullpunktsenergie des Vakuums wäre damit beseitigt.

Ich finde diese Argumentation nicht überzeugend, sie erscheint mir wie ein Taschenspielertrick. Wenn es durch Herumbasteln an der klassischen Hamiltonfunktion möglich ist, unterschiedliche quantenmechanische Resultate zu erhalten, ist dies meiner Meinung nach ein Hinweis, dass die gängige Methode zur "Herleitung" der Quantentheorie aus dem klassischen Hamiltonformalismus, die darin besteht, die kanonischen Variablen durch die betreffenden Operatoren zu ersetzen, nur mit Vorsicht und einer gewissen Skepsis angewandt werden sollte.

### Die Notwendigkeit der Nullpunktsenergie

Der Trick, die problematischen Nullpunktsenergien des quantisierten Strahlungsfeldes unter den Teppich zu kehren, könnte meiner Ansicht nach auch auf den ganz normalen harmonischen Oszillatoren der Quantenmechanik angewandt werden. Dazu gehen wir von dritten Darstellung des Hamiltonoperators in Gl. (1.7) aus

$$\hat{H} = \frac{\hbar \omega}{2} (\hat{C}^+ \hat{C}^- + \hat{C}^- \hat{C}^+).$$

Geht man jetzt einen Schritt zurück in den klassischen Hamiltonformalismus und ersetzt die Operatoren  $\hat{C}^+$  und  $\hat{C}^-$  durch die entsprechend definierten komplexen Koeffizienten:

$$C^+ = \frac{1}{\sqrt{2 \hbar \omega}} (-i P + \omega Q), \quad C^- = \frac{1}{\sqrt{2 \hbar \omega}} (i P + \omega Q),$$

so lautet die Hamiltonfunktion

$$H = \frac{\hbar \omega}{2} (C^+ C^- + C^- C^+).$$

Da die komplexen Zahlen  $C^+$  und  $C^-$  vertauschbar sind, kann man die Hamiltonfunktion auch in folgender Form schreiben

$$H = \hbar \omega C^+ C^-$$

Der Übergang in die Quantentheorie ergibt dann einen modifizierten Hamiltonoperator

$$\hat{H}' = \hbar \omega \hat{C}^+ \hat{C}^- , \quad (4.7)$$

der die Eigenwerte  $E_n = n \hbar \omega$  hat. Die Nullpunktsenergie tritt nicht mehr auf.

Das ist völlig unakzeptabel. Ein harmonischer Oszillatator ohne Nullpunktsenergie wäre eine Katastrophe für die Quantentheorie: die Heisenberg'sche Unschärferelation wäre in eklatanter Weise verletzt, denn aus  $E_0 = 0$  folgt  $\Delta x \cdot \Delta p = 0$ .

Es gibt aber nicht nur theoretische Argumente für die Existenz der Nullpunktsenergie, es gibt auch experimentelle Beweise. Ein schönes Beispiel findet man in den Vibrationsbewegungen zweiatomiger Moleküle. Infolge der kovalenten Bindung besteht eine anziehende Wechselwirkung zwischen den beiden H-Atomen im Wasserstoffmolekül. Die potentielle Energie ist in Abb. 4.2 als Funktion des Kernabstands aufgetragen. In der Nähe des Gleichgewichtsabstands  $R_0$  hat das Potential einen annähernd parabelförmigen Verlauf.

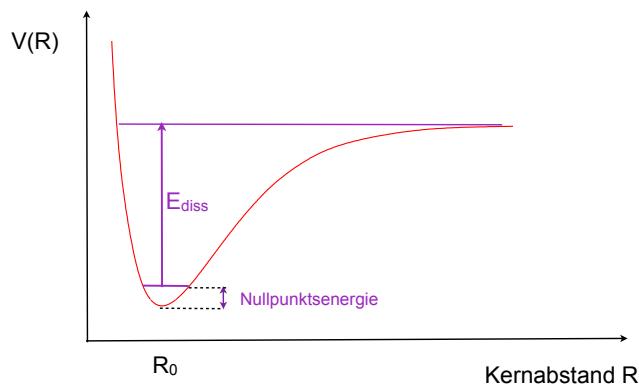


Abbildung 4.2: Die potentielle Energie des  $H_2$ -Moleküls als Funktion des Kernabstands  $R$ .

gen Verlauf, und man erhält die äquidistanten Energieniveaus eines quantenmechanischen harmonischen Oszillators, was durch die Messung der Vibrationspektren leicht nachweisbar ist. (Mit wachsendem Kernabstand flacht das Potential ab im Vergleich zu einer Parabel, und der Abstand der Niveaus wird geringer). Als *Dissoziationsenergie*  $E_{\text{diss}}$  bezeichnet man die Energie, die aufgewendet werden muss, um das Molekül in zwei getrennte, weit voneinander entfernte Atome zu zerlegen. Man könnte vermuten, dass  $E_{\text{diss}} = V(\infty) - V(R_0)$  ist, also gleich der Differenz zwischen der potentiellen Energie von zwei weit voneinander entfernten Atomen und der potentiellen Energie am Gleichgewichtsabstand. Diese einfache Beziehung muss durch die Nullpunktsenergie modifiziert werden, denn der energetisch tiefste Zustand ist nicht  $V(R_0)$ , sondern  $V(R_0) + \hbar\omega/2$ . Es gilt also

$$E_{\text{diss}} = V(\infty) - [V(R_0) + \hbar\omega/2] . \quad (4.8)$$

Wenn man sich auf den normalen Wasserstoff beschränkt, hilft diese Gleichung nicht allzuviel, da das Potential  $V(R)$  nicht mit hinreichender Genauigkeit bekannt ist. Zusätzlich muss man die mit schwerem Wasserstoff (Deuterium) gebildeten Moleküle HD und  $D_2$  analysieren. Der Potentialverlauf  $V(R)$  hängt nur von den Kernladungen und der Elektronenwolke ab und ist identisch bei den drei Molekültypen  $H_2$ , HD und  $D_2$ , der Gleichgewichtsabstand ist  $R_0 = 0.74 \cdot 10^{-10} \text{ m}$  in allen drei Fällen. Die Vibrationsfrequenzen hängen dagegen von den reduzierten Massen der drei Moleküle ab und unterscheiden sich deutlich:

$$\omega_{D_2} = \frac{1}{\sqrt{2}} \omega_{H_2} , \quad \omega_{HD} = \frac{\sqrt{3}}{2} \omega_{H_2}$$

Die gemessenen Dissoziationsenergien der Moleküle  $H_2$ , HD und  $D_2$  sind in der Tat verschieden und erlauben die Bestimmung der Nullpunktsenergien. Damit ist deren Existenz zweifelsfrei bewiesen.

### Gibt es einen Unterdrückungsmechanismus extrem hoher Frequenzen?

Die Formel (2.5) zeigt, dass die Zahl der elektromagnetischen Eigenschwingungen in einem Kasten quadratisch mit der Frequenz anwächst. Demnach sollte es eine Million mal mehr  $\gamma$ -Quanten mit 1 GeV als mit 1 MeV geben, eine Million mal mehr  $\gamma$ -Quanten mit 1 TeV als mit 1 GeV, eine Million mal mehr  $\gamma$ -Quanten mit 1000 TeV als mit 1 TeV.... und so weiter, bis ins Unendliche. Ich halte diese Sichtweise für völlig absurd, und eine Theorie, die darauf beruht, kann gar nicht richtig und in sich konsistent sein.

Die kritiklose Anwendung der Formel (2.5) führte zur sog. "Ultraviolett Katastrophe" der Strahlung des schwarzen Körpers<sup>1</sup>, die Ende des 19. Jahrhunderts das Weltbild der klassischen Physik erschütterte. Die klassische Rayleigh-Jeans-Formel für die spektrale Energiedichte ergab sich, indem man die Zustandsdichte (2.5) mit der mittleren thermischen Energie eines harmonischen Oszillators multiplizierte, die nach dem Gleichverteilungssatz der Thermodynamik den Wert  $k_B T$  hat

$$u_{\text{klass}}(\omega) d\omega = \rho(\omega) k_B T d\omega = \frac{\omega^2}{\pi^2 c^3} k_B T d\omega. \quad (4.9)$$

Diese Formel widerspricht dem Energiesatz und allen experimentellen Beobachtungen.

Der 14. Dezember 1900 war gewissermaßen der Geburtstag der Quantentheorie: Max Planck stellte auf der Tagung der Deutschen Physikalischen Gesellschaft seine Theorie der Strahlung des schwarzen Körpers vor, mit der ihm eine quantitative Beschreibung gelang. Der Preis dafür war hoch. Planck musste den Boden der klassischen Physik verlassen und die Annahme machen, dass die Schwingungsenergie der beteiligten Atome oder Moleküle quantisiert und proportional zur Frequenz ist:  $E = h\nu$  mit einer neuen Naturkonstanten  $h$ , dem Planckschen Wirkungsquantum. Die von Planck hergeleitete Strahlungsformel lautet

$$u_{\text{Planck}}(\omega) d\omega = \rho(\omega) \frac{\hbar\omega}{e^{\hbar\omega/(k_B T)} - 1} d\omega = \frac{\omega^2}{\pi^2 c^3} \frac{\hbar\omega}{e^{\hbar\omega/(k_B T)} - 1} d\omega. \quad (4.10)$$

Was ist neu im Vergleich zur Rayleigh-Jeans-Formel? Die mittlere thermische Energie eines Quantenoszillators ist nicht  $k_B T$ , sondern

$$\bar{E} = \frac{\hbar\omega}{e^{\hbar\omega/(k_B T)} - 1}. \quad (4.11)$$

Die Nullpunktsenergie  $\hbar\omega/2$  ist hier subtrahiert worden, die Gleichung beschreibt also präzise gesagt die thermische Anregungsenergie. Bei niedrigen Frequenzen ( $\hbar\omega \ll k_B T$ ) strebt  $\bar{E}$  gegen den klassischen Wert  $k_B T$ , aber bei hohen Frequenzen geht  $\bar{E}$  gegen null. Mit anderen Worten: hohe Frequenzen werden durch die Quantentheorie stark unterdrückt, und der Grenzfall  $\omega \rightarrow \infty$  tritt überhaupt nicht auf.

Meine Vermutung ist, dass für die Nullpunktsschwingungen ein ähnlicher Unterdrückungsmechanismus extrem hoher Frequenzen existieren sollte, aber man braucht wohl einen Physiker vom Format Max Plancks, um dies theoretisch zu rechtfertigen. Sollte die Vermutung richtig sein, so wäre die Energie des Vakuumzustands endlich, und die Nullpunktsenergien der Schwingungsmoden mit endlicher Frequenz könnten beibehalten werden.

---

<sup>1</sup>Unter einem schwarzen Körper versteht man einen Körper, der alle einfallende Strahlung zu 100% absorbiert. Eine mattschwarz gefärbte Metall- oder Kunststoff-Oberfläche erfüllt dies Kriterium nur unvollkommen. Die beste Approximation ist ein Hohlraum mit dunklen Wänden, in den die Strahlung durch ein kleines Loch eintritt. Durch vielfache Absorption und Reflexion im Innern wird die Strahlung immer weiter abgeschwächt, und es besteht nur eine sehr geringe Wahrscheinlichkeit, dass Strahlung durch das Loch wieder entweicht. Diese Öffnung sieht also sehr "schwarz" aus.

## Literaturverzeichnis

- [1] Peter Schmüser, *Theoretische Physik für Studierende des Lehramts 1, Quantenmechanik*, Springer 2012
- [2] Victor F. Weisskopf, *The development of field theory in the last 50 years*, Physics Today November 1981, p. 69
- [3] L. D. Landau und E. M. Lifschitz, Lehrbuch der Theoretischen Physik Band IV *Quantenelektrodynamik*, Akademie-Verlag Berlin, 7. Auflage 1991
- [4] Walter Heitler, *The Quantum Theory of Radiation*, Oxford University Press 1954
- [5] Richard Becker, G. Leibfried, W. Brenig (Hrsg. Fritz Sauter), *Theorie der Elektrizität*, Zweiter Band, Teubner 1958
- [6] David. J. Griffiths, *Introduction to Quantum Mechanics*, Pearson Education Ltd. 2005
- [7] Serge Haroche and Daniel Kleppner, *Cavity Quantum Electrodynamics*, Physics Today January 1989, p. 24
- [8] Serge Haroche and Jean-Michel Raimond, *Exploring the Quantum*, Oxford University Press 2006
- [9] Peter Schmüser, Martin Dohlus, Jörg Rossbach, Christopher Behrens, *Free-Electron Lasers in the Ultraviolet and X-Ray Regime*, Springer 2014
- [10] J.M.J. Madey, *Stimulated Emission of Bremsstrahlung in a Periodic Magnetic Field*, J. Appl. Phys. **42**, 1906 (1971)