1.3 Strahlung als Störung [Sakurai 5.7]

Das Ziel sei jetzt:
(i) ein elektromagnetisches Feld als Störung ($\hat{V}$) einzuführen;
(ii) damit eine physikalische Anwendung der Fermi-Regel durchzuarbeiten;
(iii) anschliessend noch einige „Probleme" des Verfahrens zu betrachten.

(i) Geladenes Teilchen im elektromagnetischen Feld

Elektrodynamik:
- Potentiale: $\vec{B} = \nabla \times \vec{A}$; $\vec{E} = -\nabla\phi - \frac{1}{c}\dot{\vec{A}}$
- Eichtransformation: $\vec{A}' = \vec{A} + \nabla\chi$; $\phi' = \phi - \frac{1}{c}\dot{\chi}$
- Eichbedingungen: $\nabla\cdot\vec{A} = 0$ (Coulomb) ; $\frac{1}{c}\dot{\phi} + \nabla\cdot\vec{A} = 0$ (Lorenz)
- Lorentz-Kraft: $\vec{F}_L = q\left(\vec{E} + \frac{\vec{v}}{c}\times\vec{B}\right)$

Welche Lagrange-Funktion L und Hamilton-Funktion H braucht man in der klassischen Mechanik, um $\vec{F}_L$ wiederherzustellen?

Behauptung:
$$L = \frac{m\vec{v}^2}{2} - q\left(\phi - \frac{\vec{v}}{c}\cdot\vec{A}\right)$$

Beweis:
$$\frac{\partial L}{\partial x_i} = -q\left(\partial_i\phi - \frac{v_j}{c}\partial_i A_j\right) \quad ; \quad \frac{\partial L}{\partial v_i} = m v_i + \frac{q}{c}A_i$$
$$\frac{d}{dt}\left(\frac{\partial L}{\partial v_i}\right) = m\dot{v}_i + \frac{q}{c}\left(v_j\partial_j A_i + \partial_t A_i\right)$$
$$\frac{d}{dt}\left(\frac{\partial L}{\partial v_i}\right) = \frac{\partial L}{\partial x_i} \quad\Rightarrow\quad m\dot{v}_i = q\Big(\underbrace{-\partial_i\phi - \frac{1}{c}\partial_t A_i}_{E_i} + \underbrace{\frac{v_j}{c}\left(\partial_i A_j - \partial_j A_i\right)}_{\frac{1}{c}\varepsilon_{ijm}\varepsilon_{mkl}v_j\partial_k A_l \,=\, \left[\frac{\vec{v}}{c}\times(\nabla\times\vec{A})\right]_i}\Big) \quad \blacksquare$$

Behauptung:
$$H = \frac{1}{2m}\left(\vec{p} - \frac{q}{c}\vec{A}\right)^2 + q\phi$$

Beweis:
$$H = \sum_i v_i\frac{\partial L}{\partial v_i} - L = \sum_i\left\{m v_i^2 + \cancel{\frac{q}{c}v_i A_i} - \frac{m v_i^2}{2} + q\phi - \cancel{\frac{q}{c}v_i A_i}\right)$$
$$= \frac{m\vec{v}^2}{2} + q\phi \quad ; \quad p_i := \frac{\partial L}{\partial v_i} = m v_i + \frac{q}{c}A_i \quad\Rightarrow\quad \blacksquare$$

Quantenmechanisch: Setze $\vec{p}\to\hat{\vec{p}}$, $\vec{x}\to\hat{\vec{x}}$ und behalte (Begründung folgt später (Kap. 3.1)) „natürliche" Ordnung:
$$\hat{H} = \frac{1}{2m}\left(\hat{\vec{p}} - \frac{q}{c}\vec{A}(\hat{\vec{x}},t)\right)\cdot\left(\hat{\vec{p}} - \frac{q}{c}\vec{A}(\hat{\vec{x}},t)\right) + q\phi(\hat{\vec{x}},t)$$
$$= \frac{1}{2m}\left[\hat{\vec{p}}^2 - \frac{q}{c}\left\{\hat{\vec{p}}\cdot\vec{A}(\hat{\vec{x}},t) + \vec{A}(\hat{\vec{x}},t)\cdot\hat{\vec{p}}\right\} + \frac{q^2}{c^2}\vec{A}^2(\hat{\vec{x}},t)\right] + q\phi(\hat{\vec{x}},t).$$

In der Ortsdarstellung: $\hat{\vec{p}} \to -i\hbar\nabla$.
Der „Antikommutator" ist nichttrivial:
$$\langle\vec{x}|\hat{\vec{p}}\cdot\vec{A} + \vec{A}\cdot\hat{\vec{p}}|\psi\rangle = -i\hbar\nabla\cdot(\vec{A}\psi) + \vec{A}\cdot(-i\hbar\nabla\psi)$$
$$= -i\hbar(\nabla\cdot\vec{A})\psi + 2\vec{A}\cdot(-i\hbar\nabla\psi)$$

verschwindet in Coulomb-Eichung

Fazit:
$$\hat{H} = \underbrace{\hat{H}_0}_{\frac{\hat{\vec{p}}^2}{2m}} + \hat{V}(\hat{\vec{x}},t) \quad ; \quad \hat{V}(\hat{\vec{x}},t) = -\frac{q}{2mc}\left[\hat{\vec{p}},\vec{A}(\hat{\vec{x}},t)\right] - \frac{q}{mc}\vec{A}(\hat{\vec{x}},t)\cdot\hat{\vec{p}} + \frac{q^2}{2mc^2}\vec{A}^2(\hat{\vec{x}},t) + q\phi(\hat{\vec{x}},t)$$

(ii) Anwendung: Geladenes Teilchen in ebener Welle

Elektrodynamik: (Spezialfall)

$$\vec E(\vec x,t) = \vec\lambda\,\mathrm{Re}\left[e^{-i\omega t + i\vec k\cdot\vec x}\right] \quad ; \quad \omega := c|\vec k|$$

$$\vec B(\vec x,t) = \vec n\times\vec\lambda\,\mathrm{Re}\left[e^{-i\omega t+i\vec k\cdot\vec x}\right] \quad ; \quad \vec n := \frac{\vec k}{|\vec k|} \quad ; \quad \vec n\cdot\vec\lambda = 0$$

Darstellung:

$$\phi(\vec x,t)=0, \quad \vec A(\vec x,t) = \vec\lambda\,\mathrm{Re}\left[\frac{c}{i\omega}e^{-i\omega t+i\vec k\cdot\vec x}\right] \quad ; \quad \frac{c}{\omega}=\frac{1}{|\vec k|}$$

$$\left(\nabla\times\vec A = \vec k\times\vec\lambda\,\mathrm{Re}\left[\frac{c}{\omega}e^{-i\omega t+i\vec k\cdot\vec x}\right] \quad ; \quad \nabla\cdot\vec A = \vec k\cdot\vec\lambda\,\mathrm{Re}\left[\frac{c}{\omega}e^{-i\omega t+i\vec k\cdot\vec x}\right]=0\right)$$

$$\frac{\vec k c}{\omega} = \frac{\vec k}{|\vec k|} = \vec n \qquad\qquad \frac{\vec k c}{\omega} = \vec n$$

Sei $|\vec\lambda|$ „klein"; der quadratische Term kann dann vernachlässigt werden, und

$$\hat V(\hat{\vec x},t) \underset{\text{Seite 11}}{=} -\frac{q}{mc}\cdot\frac{c}{\omega}\cdot\sin(\vec k\cdot\hat{\vec x}-\omega t)\,\vec\lambda\cdot\hat{\vec p}.$$

Die Herleitung läuft wie früher (Seiten 8/9); einziger Unterschied ist, dass $\langle f_I|\hat V_I(t_1)|i_I\rangle$ zusätzliche Zeitabhängigkeit besitzt:

$$\langle f_I|\, e^{\frac{i}{\hbar}\hat H_0 t_1}\, \frac{e^{i\vec k\cdot\hat{\vec x}-i\omega t_1} - e^{-i\vec k\cdot\hat{\vec x}+i\omega t_1}}{2i}\cdot\vec\lambda\cdot\hat{\vec p}\cdot e^{-\frac{i}{\hbar}\hat H_0 t_1}\,|i_I\rangle$$

$$= \frac{1}{2i}\left\{ e^{\frac{i}{\hbar}(E_f-E_i-\hbar\omega)t_1}\langle f_I|e^{i\vec k\cdot\hat{\vec x}}\,\vec\lambda\cdot\hat{\vec p}\,|i_I\rangle - e^{\frac{i}{\hbar}(E_f-E_i+\hbar\omega)t_1}\langle f_I|e^{-i\vec k\cdot\hat{\vec x}}\,\vec\lambda\cdot\hat{\vec p}\,|i_I\rangle\right\}.$$

Sei $E_f > E_i$ („Absorption"); nur der erste Term gibt einen Beitrag, und

$$\Gamma^{abs}_{fi} = \frac{2\pi}{\hbar}\left(\frac{q}{2m\omega}\right)^2 \left|\langle f_I|e^{i\vec k\cdot\hat{\vec x}}\,\vec\lambda\cdot\hat{\vec p}\,|i_I\rangle\right|^2\delta(E_f-E_i-\hbar\omega).$$

Dividiert man durch die ursprüngliche (zeitgemittelte) Energiestromdichte,

Elektrodynamik: $\langle\vec S\rangle = \frac{c}{8\pi}|\vec\lambda|^2\,\vec n$,

erhält man einen „Absorptionsquerschnitt" (vgl. Seite 10):

$$\sigma^{abs}_{fi} := \frac{\hbar\omega\,\Gamma^{abs}_{fi}}{|\langle\vec S\rangle|} = \frac{4\pi^2 q^2}{m^2}\cdot\frac{1}{\omega c}\cdot\left|\langle f_I|e^{i\vec k\cdot\hat{\vec x}}\,\underbrace{\frac{\vec\lambda}{|\vec\lambda|}}_{\vec e_\lambda\ \text{(Polarisationsvektor)}}\cdot\hat{\vec p}\,|i_I\rangle\right|^2\delta(E_f-E_i-\hbar\omega).$$

Bemerkungen:

* Nur $\frac{\vec\lambda}{|\vec\lambda|}$ taucht auf, d.h. σ^{abs}_{fi} ist eine Eigenschaft der „Licht-Materie-Wechselwirkung", aber unabhängig von der Intensität der ursprünglichen Strahlung.
* Weitere Vereinfachungen möglich, z.B. $\vec k$ „klein" (grosse Wellenlänge) sowie

$$\frac{\hat{\vec p}}{m} = \frac{1}{i\hbar}\left[\hat{\vec x},\frac{\hat{\vec p}^2}{2m}\right] = \frac{1}{i\hbar}\left[\hat{\vec x},\hat H_0\right] \ ;$$

$$\langle f_I|[\hat{\vec x},\hat H_0]|i_I\rangle = \overbrace{(E_i-E_f)}^{-\hbar\omega}\langle f_I|\hat{\vec x}\,|i_I\rangle$$

$$\Rightarrow \sigma^{abs}_{fi} \approx 4\pi^2\frac{q^2}{\hbar c}\,\omega\,\left|\langle f_I|\frac{\vec\lambda}{|\vec\lambda|}\cdot\hat{\vec x}\,|i_I\rangle\right|^2\delta\!\left(\frac{E_f-E_i}{\hbar}-\omega\right)$$

„Dipolnäherung"

* $|i_I\rangle$ = gebundener Zustand, $|f_I\rangle$ = Streuzustand ⇒ Photoeffekt. (Übungsaufgabe.)

(iii) Über den Gültigkeitsbereich der zeitabhängigen Störungstheorie [Sakurai 5.5]

Um die Konvergenz der Störungsreihe zu prüfen wird ein System betrachtet, welches auch exakt lösbar ist. Sei (vgl. Übungsaufgabe)

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

$$\hat{H}_0 := \begin{pmatrix} \alpha & 0 \\ 0 & \alpha \end{pmatrix} \quad ; \quad \hat{V}(t) := \begin{pmatrix} 0 & \delta e^{i\omega t} \\ \delta e^{-i\omega t} & 0 \end{pmatrix} .$$

Das System sei beim $t=0$ im Zustand $\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$. Welche ist die Übergangsrate in den Zustand $\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$?

Erste Ordnung

Wie auf Seite 8: $\langle f_I | \hat{U}_I(t;0) | i_I \rangle$

$$\approx (0\ 1) \left| \mathbb{1} - \frac{i}{\hbar} \int_0^t dt_1\, \hat{V}_I(t_1) \right| \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$= -\frac{i}{\hbar} \int_0^t dt_1\, (0\,1)\, e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}_0 t_1} \begin{pmatrix} 0 & \delta e^{i\omega t} \\ \delta e^{i\omega t} & 0 \end{pmatrix} e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}_0 t_1} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$= -\frac{i}{\hbar} \int_0^t dt_1\, e^{\frac{i}{\hbar}(\alpha-\alpha)t_1}\, (0\,1) \begin{pmatrix} 0 & \delta e^{i\omega t} \\ \delta e^{i\omega t} & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$= -\frac{i\delta}{\hbar} \int_0^t dt_1\, e^{-i\omega t} = \frac{\delta}{\hbar\omega}\left[e^{-i\omega t} - 1\right] = \frac{-2i\delta e^{-\frac{i\omega t}{2}}}{\hbar\omega} \sin\left(\frac{\omega t}{2}\right)$$

Übergangswahrscheinlichkeit: $P_{fi} = |\langle f_I | \hat{U}_I(t;0) | i_I \rangle|^2 = \frac{4\delta^2}{\hbar^2\omega^2} \sin^2\left(\frac{\omega t}{2}\right)$.

Übergangsrate: $\Gamma_{fi} = \frac{d}{dt} |\langle f_I | \hat{U}_I(t;0) | i_I \rangle|^2 = \frac{4\delta^2}{\hbar^2\omega^2} \cdot 2 \cdot \sin\left(\frac{\omega t}{2}\right) \cdot \cos\left(\frac{\omega t}{2}\right) \cdot \frac{\omega}{2}$

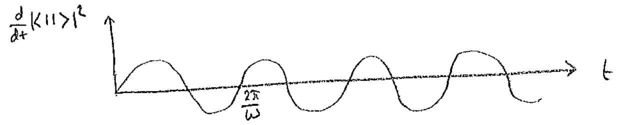
$$= \frac{2\delta^2}{\hbar^2\omega} \sin(\omega t) .$$

Wie auf Seite 8: $\lim_{t\to\infty} \frac{\sin(\omega t)}{\pi\omega} = \delta(\omega)$; $\lim_{t\to\infty} \frac{d}{dt} |\langle f_I | \hat{U}_I | i_I \rangle|^2 = \frac{2\pi\delta^2}{\hbar^2} \delta(\omega)$.

Bemerkungen:

* $\boxed{\omega \neq 0}$

Übergangsrate selbst ist endlich:



Trotzdem $\lim_{t\to\infty} \Gamma_{fi} = 0$ im Sinne einer Distribution in der Variable ω (vgl. Seite 8).

* $\boxed{\omega = 0}$

$$\lim_{\omega\to 0} \frac{\sin(\omega t)}{\omega} = t$$

$\Rightarrow$ Übergangsrate wächst mit Zeit : $\frac{d}{dt} |\langle f_I | \hat{U}_I | i_I \rangle|^2 = \frac{2\delta^2 t}{\hbar^2}$

$\Rightarrow$ Übergangswahrscheinlichkeit divergiert : $|\langle f_I | \hat{U}_I | i_I \rangle|^2 = \frac{\delta^2 t^2}{\hbar^2}$

$\Rightarrow$ „Verletzung der Unitarität" für $t \gtrsim \frac{\hbar}{\delta}$ ↯

Exakte Lösung

$$\hat V_I(t) = e^{\frac{i}{\hbar}\hat H_0 t}\,\hat V\,e^{-\frac{i}{\hbar}\hat H_0 t} = \begin{pmatrix} e^{\frac{i\alpha t}{\hbar}} & 0 \\ 0 & e^{\frac{i\alpha t}{\hbar}} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 0 & \delta e^{i\omega t} \\ \delta e^{-i\omega t} & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} e^{-\frac{i\alpha t}{\hbar}} & 0 \\ 0 & e^{-\frac{i\alpha t}{\hbar}} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & \delta e^{i\omega t} \\ \delta e^{-i\omega t} & 0 \end{pmatrix}.$$

Ansatz: $\hat U_I(t;0) = \begin{pmatrix} e(t) & f(t) \\ g(t) & h(t) \end{pmatrix}$

Bewegungsgleichung: $i\hbar \begin{pmatrix} \dot e & \dot f \\ \dot g & \dot h \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & \delta e^{i\omega t} \\ \delta e^{-i\omega t} & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} e & f \\ g & h \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} g\delta e^{i\omega t} & h\delta e^{i\omega t} \\ e\delta e^{-i\omega t} & f\delta e^{-i\omega t} \end{pmatrix}$

$$\Rightarrow \begin{cases} i\hbar\dot e = g\delta e^{i\omega t} \\ i\hbar\dot g = e\delta e^{-i\omega t} \end{cases} \quad \& \quad \begin{cases} i\hbar\dot f = h\delta e^{i\omega t} \\ i\hbar\dot h = f\delta e^{-i\omega t} \end{cases}$$

$$\Downarrow$$

Sei $\tilde h = h e^{i\omega t} \Rightarrow \dot{\tilde h} = \dot h e^{i\omega t} + i\omega h e^{i\omega t} = \frac{\delta}{i\hbar} f + i\omega\tilde h$

$$\Rightarrow \ddot{\tilde h} = \frac{\delta}{i\hbar}\dot f + i\omega\dot{\tilde h} = -\frac{\delta^2}{\hbar^2}\tilde h + i\omega\dot{\tilde h}$$

$$\Leftrightarrow \ddot{\tilde h} - i\omega\dot{\tilde h} + \frac{\delta^2}{\hbar^2}\tilde h = 0 \qquad \boxed{\text{lineare DG 2. Ordnung!}}$$

Charakteristische Gleichung: $\tilde h = e^{\alpha t}$, $\alpha \in \mathbb{C}$

$$\Rightarrow \left(\alpha^2 - i\omega\alpha + \frac{\delta^2}{\hbar^2}\right) = 0$$

$$\Rightarrow \alpha = \frac{i\omega}{2} \pm \sqrt{-\frac{\omega^2}{4} - \frac{\delta^2}{\hbar^2}} = \frac{i\omega}{2} \pm i\sqrt{\frac{\omega^2}{4} + \frac{\delta^2}{\hbar^2}}$$

Allgemeine Lösung: $h = \tilde h e^{-i\omega t} = e^{-\frac{i\omega t}{2}}\left[c_1\cos(t\sqrt{\;}) + c_2\sin(t\sqrt{\;})\right].$

$$\Rightarrow f = \frac{i\hbar}{\delta}e^{i\omega t}\dot h = \frac{\hbar\omega}{2\delta}e^{\frac{i\omega t}{2}}\left[c_1\cos(t\sqrt{\;}) + c_2\sin(t\sqrt{\;})\right] + \frac{i\hbar}{\delta}\sqrt{\;}\,e^{\frac{i\omega t}{2}}\left[-c_1\sin(t\sqrt{\;}) + c_2\cos(t\sqrt{\;})\right].$$

Folglich: (f→e, h→g)

$$e = e^{\frac{i\omega t}{2}}\cdot\frac{\hbar}{\delta}\left[\left(\frac{\omega}{2}c_1 + i\sqrt{\;}c_2\right)\cos(t\sqrt{\;}) + \left(\frac{\omega}{2}c_2 - i\sqrt{\;}c_1\right)\sin(t\sqrt{\;})\right]$$

$$g = e^{-\frac{i\omega t}{2}}\left[c_1\cos(t\sqrt{\;}) + c_2\sin(t\sqrt{\;})\right].$$

Anfangsbedingungen:

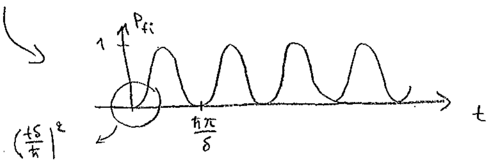
$$\begin{cases} e(0) = 1 \\ g(0) = 0 \end{cases} \Leftrightarrow \begin{cases} 1 = \frac{\hbar}{\delta}\left(\frac{\omega}{2}c_1 + i\sqrt{\;}c_2\right) \\ 0 = c_1 \end{cases} \Rightarrow c_2 = \frac{\delta}{i\hbar\sqrt{\;}}$$

$$\Rightarrow g(t) = e^{-\frac{i\omega t}{2}}\cdot\frac{\delta}{i\hbar\sqrt{\;}}\cdot\sin(t\sqrt{\;}).$$

Übergangswahrscheinlichkeit: $P_{fi} = \left|(0\ 1)\,\hat U_I\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}\right|^2 = |g(t)|^2 = \dfrac{\delta^2/\hbar^2}{\omega^2/4 + \delta^2/\hbar^2}\sin^2\left(t\sqrt{\frac{\omega^2}{4} + \frac{\delta^2}{\hbar^2}}\right)$

Zur ersten Ordnung in δ^2: $P_{fi} \approx \dfrac{4\delta^2}{\hbar^2\omega^2}\sin^2\left(\dfrac{t\omega}{2}\right)$ $\quad$ genau wie auf Seite 13!

$\omega = 0 \Rightarrow P_{fi} = \sin^2\left(\frac{t\delta}{\hbar}\right)$; $\frac{d}{dt}|g(t)|^2 = \frac{\delta}{\hbar}\sin\left(\frac{2t\delta}{\hbar}\right)$.



(Sakurai, Seite 325: mindestens vier Nobelpreise für Physik dieser Art!)

Fazit:

* Bei <u>diskreten Endzuständen</u> funktioniert zeitabhängige Störungstheorie nur bei endlichen (kleinen) Zeitintervallen.
* Bei <u>kontinuierlichen Endzuständen</u> ist die Fermi-Regel in Ordnung, falls $\delta(E_f - E_i)$ durch $dN_f/dE_f|_{E_f=E_i}$ ersetzt wird.

— o — o —