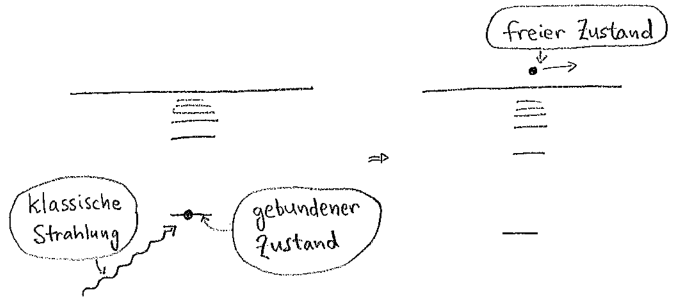
6.3 Wechselwirkung mit Atomen [Münster 19.3-4]

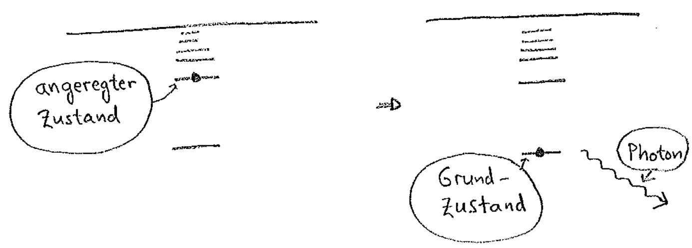
Kapitel 1.3 / Aufgabe 3.2: Photoeffekt :



Wechselwirkung =: $\hat{V} \approx -\frac{q}{mc}\,\hat{\vec{A}}(\hat{\vec{x}},t)\cdot\hat{\vec{p}}$

$\Rightarrow \; \Gamma^{abs}_{fi} = \frac{4\pi^2 q^2}{m^2 \omega c} \left|\langle f_I | e^{i\vec{k}\cdot\hat{\vec{x}}}\, \vec{e}_\lambda \cdot \hat{\vec{p}}\, | i_I\rangle\right|^2 \delta(E_f - E_i - \hbar\omega)$

Jetzt: „umgekehrt" : Spontane Emission :



Gebraucht wird:

* $\hat{V}$ aber jetzt mit quantisiertem Feld (Seite 85) :

$$\hat{V} = \underbrace{-\frac{q}{2mc}\sum_j \left[\hat{p}_j, \hat{A}_j\right]}_{\substack{\text{Aufgabe 12.2:}\\ i\hbar\nabla\cdot\hat{\vec{A}} = 0}} \underbrace{- \frac{q}{mc}\,\hat{\vec{A}}\cdot\hat{\vec{p}}}_{\text{Effekt!}} + \underbrace{\frac{q^2}{2mc^2}\hat{\vec{A}}^2}_{\text{„}\mathcal{O}(q^2\vec{A}^2)\text{"}} + \underbrace{q\hat{\phi}}_{\substack{\text{spielt keine Rolle}\\ \text{in der „Strahlungseichung"}}}$$

* Im Dirac-Bild (Seite 89) :

$$\hat{\vec{A}}_I(\vec{x},t) = \sqrt{\frac{4\pi c^2\hbar}{(2\pi)^3}} \int \frac{d^3\vec{k}}{\sqrt{2\omega_{\vec{k}}}} \sum_\lambda \left\{ \vec{e}_{\vec{k},\lambda}\, \hat{a}_{\vec{k},\lambda}\, e^{-i\omega_{\vec{k}}t + i\vec{k}\cdot\vec{x}} + \text{H.c.} \right\}$$

$$\underset{\text{Würfelnormierung}}{=} \sqrt{\frac{4\pi c^2\hbar}{L^3}} \sum_{\vec{k}} \frac{1}{\sqrt{2\omega_{\vec{k}}}} \sum_\lambda \left\{ \text{—— " ——} \right\} .$$

* Fermis goldene Regel (Seiten 8, 12; Aufgabe 3.1) :

$$\Gamma_{fi} = \frac{2\pi}{\hbar}\,\delta(E_f - E_i \pm \hbar\omega_{\vec{k}})\, \left|\langle f_I | \hat{V} | i_I\rangle\right|^2$$

ohne $e^{\pm i\omega_{\vec{k}} t}$, weil diese in Dirac-Delta.

* Zustandsdichte (wie Seite 10 aber jetzt mit Photonen) :

Würfelnormierung : $\vec{k} = \frac{2\pi}{L}\vec{n}, \quad \vec{n} \in \mathbb{Z}^3$

$\Rightarrow \; dN = dn_x\, dn_y\, dn_z = \left(\frac{L}{2\pi}\right)^3 dk_x\, dk_y\, dk_z \approx \left(\frac{L}{2\pi}\right)^3 k^2\, dk\, d\Omega_{\vec{k}}$

$E_\gamma = \hbar\omega_{\vec{k}} = \hbar c k \quad \Rightarrow \quad dk = \frac{dE_\gamma}{\hbar c}$

$\Rightarrow \; \frac{dN}{dE_\gamma} = \left(\frac{L}{2\pi}\right)^3 \frac{k^2}{\hbar c}\, d\Omega_{\vec{k}} .$

Diese Funktion ersetzt $\delta(E_f - E_i + \hbar\omega_{\vec{k}})$ im Falle von Emission.

Zerfallsamplitude:

$$|i_I\rangle := \underbrace{|i_A\rangle}_{\text{Anfangszustand des Atoms}} \otimes \underbrace{|0\rangle}_{\text{keine Photonen}}$$

$$|f_I\rangle := |f_A\rangle \otimes \underbrace{|\vec{k},\lambda\rangle}_{\hat{a}^+_{\vec{k},\lambda}|0\rangle}$$

$$\hat{\vec{A}} \to \underbrace{\sqrt{\frac{4\pi c^2\hbar}{L^3}}}_{\text{Würfelnormierung}} \sum_{\vec{q}} \frac{1}{\sqrt{2\omega_{\vec{q}}}} \sum_{\lambda'} \left\{ \vec{e}^{\,*}_{\vec{q},\lambda'}\, \hat{a}^+_{\vec{q},\lambda'}\, \underbrace{e^{-i\vec{q}\cdot\vec{x}}}_{\text{Zeitabhängigkeit schon behandelt}} + \underbrace{\ldots}_{\text{Vernichtung}} \right\}$$

$$\Rightarrow \langle f_I|\hat{V}|i_I\rangle = -\frac{q}{mc}\cdot\sqrt{\frac{4\pi c^2\hbar}{L^3}} \sum_{\vec{q},\lambda'} \frac{1}{\sqrt{2\omega_{\vec{q}}}} \langle f_A|e^{-i\vec{q}\cdot\vec{x}}\, \vec{e}^{\,*}_{\vec{q},\lambda'}\cdot\hat{\vec{p}}\,|i_A\rangle \times \underbrace{\langle \vec{k},\lambda|\hat{a}^+_{\vec{q},\lambda'}|0\rangle}_{\delta_{\vec{k},\vec{q}}\,\delta_{\lambda\lambda'}}$$

$$= -\frac{q}{m}\sqrt{\frac{4\pi\hbar}{2\omega_{\vec{k}}L^3}} \langle f_A|e^{-i\vec{k}\cdot\vec{x}}\,\vec{e}^{\,*}_{\vec{k},\lambda}\cdot\hat{\vec{p}}\,|i_A\rangle .$$

Dipolnäherung:

Wie auf Seite 12:

* Wellenlänge der Strahlung $\gg$ Radius des Atoms
  $\Leftrightarrow \vec{k}\cdot\vec{x} \ll 1 \Rightarrow e^{-i\vec{k}\cdot\vec{x}} \approx 1$.

* $$\langle f_A|\frac{\hat{\vec{p}}}{m}|i_A\rangle = \frac{1}{i\hbar}\langle f_A|[\hat{\vec{x}}, \frac{\hat{\vec{p}}^2}{2m}]|i_A\rangle = \frac{1}{i\hbar}\langle f_A|[\hat{\vec{x}}, \hat{H}_A]|i_A\rangle$$
  $$= \frac{(E_i - E_f)}{i\hbar}\langle f_A|\hat{\vec{x}}|i_A\rangle = \frac{\omega_{\vec{k}}}{i}\langle f_A|\hat{\vec{x}}|i_A\rangle .$$

Differenzielle Zerfallsrate:

$$\frac{d\Gamma_{fi}}{d\Omega_{\vec{k}}} = \frac{2\pi}{\hbar}\cdot \overbrace{\left(\frac{L}{2\pi}\right)^3 \cdot \underbrace{\frac{\omega_{\vec{k}}^2}{\hbar c^3}}_{\frac{k^2}{\hbar c}}}^{dN/dE} \cdot \overbrace{\frac{q^2\cdot 2\pi\hbar}{\omega_{\vec{k}}\cdot L^3}\cdot \omega_{\vec{k}}^2\, |\langle f_A|\vec{e}^{\,*}_{\vec{k},\lambda}\cdot\hat{\vec{x}}|i_A\rangle|^2}^{|\text{Amplitude}|^2}$$

$$= \frac{\omega_{\vec{k}}^3\, q^2}{2\pi\hbar c^3} |\langle f_A|\vec{e}^{\,*}_{\vec{k},\lambda}\cdot\hat{\vec{x}}|i_A\rangle|^2 .$$

Wenn $q \to e$, kann hier die Feinstrukturkonstante als $\alpha_{em} := \frac{e^2}{\hbar c}$ identifiziert werden.

$$\Rightarrow \boxed{\frac{d\Gamma_{fi}}{d\Omega_{\vec{k}}} = \frac{\alpha_{em}\,\omega_{\vec{k}}^3}{2\pi c^2} |\langle f_A|\vec{e}^{\,*}_{\vec{k},\lambda}\cdot\hat{\vec{x}}|i_A\rangle|^2} .$$

Dimensionen: $\frac{1}{s^3}\cdot\frac{1}{\frac{m^2}{s^2}}\cdot m^2 = \frac{1}{s}$ ok!

Lebensdauer:

Die Lebensdauer (τ) eines angeregten Zustandes sei als die Inverse der Gesamtzerfallsrate definiert, wobei für die Bestimmung der Gesamtzerfallsrate noch die folgenden Schritte genommen werden:

(i) Integration über Raumwinkel $\Omega_{\vec{k}}$;

(ii) Summierung über Polarisationszustände λ;

(iii) Summierung über eventuelle Entartung von $|f_A\rangle$;

(iv) Mittelung über eventuelle Entartung von $|i_A\rangle$ (falls genauer Zustand nicht bekannt).

— · —

(i)+(ii) Für gegebene $|i_A\rangle, |f_A\rangle$ ist $\langle f_A|\hat{\vec{x}}|i_A\rangle =: \vec{C}$ ein komplexer Vektor. Es gilt:

$$|\langle f_A|\vec{e}^{\,*}_{\vec{k},\lambda}\cdot\hat{\vec{x}}|i_A\rangle|^2 = \Big|\sum_{j=1}^{3}(e^*_{\vec{k}\lambda})_j C_j\Big|^2 = \sum_{j,i=1}^{3}(e^*_{\vec{k}\lambda})_j(e_{\vec{k}\lambda})_i C_j C_i^* .$$

Aufgabe 11.2: $\displaystyle\sum_\lambda (e^*_{\vec{k}\lambda})_j(e_{\vec{k}\lambda})_i = \delta_{ij} - \frac{k_ik_j}{k^2}$

Integrale:

* $\displaystyle\int d\Omega_{\vec{k}}\cdot\delta_{ij} = 4\pi\,\delta_{ij}$

* $\displaystyle\int d\Omega_{\vec{k}}\cdot\frac{k_ik_j}{k^2} = \begin{cases}0 & \text{für } i\neq j\\ \alpha & \text{für } i=j\end{cases}$ wegen Drehsymmetrie

$$\Rightarrow \int d\Omega_{\vec{k}}\,\frac{k_ik_j}{k^2} = \alpha\,\delta_{ij} \quad \Big|\cdot\delta_{ij}$$

$$\Rightarrow 4\pi = 3\alpha \quad\Rightarrow \alpha = \frac{1}{3}\cdot 4\pi$$

$$\Rightarrow \int d\Omega_{\vec{k}}\left(\delta_{ij}-\frac{k_ik_j}{k^2}\right) = \frac{8\pi}{3}\,\delta_{ij}$$

Insgesamt: $$\boxed{\sum_\lambda \Gamma_{fi} = \frac{4\alpha_{em}\,\omega_k^3}{3c^2}\,|\langle f_A|\hat{\vec{x}}|i_A\rangle|^2}$$

Betrag sowohl bzgl. $\mathbb{C}$ als auch Vektorraum, d.h. $\mathbb{C}^3$.

(iii)+(iv) Sei $|f_A\rangle$ g_f-Mal entartet, mit Quantenzahl m_f; und $|i_A\rangle$ g_i-Mal entartet, mit Quantenzahl m_i. Die Gesamtzerfallsrate wird als

$$\langle\Gamma_{fi}\rangle := \frac{1}{g_i}\sum_{m_i}\sum_{m_f}\sum_\lambda \Gamma_{fi}$$

definiert; und wir erhalten

$$\langle\Gamma_{fi}\rangle = \frac{4\alpha_{em}\,\omega_k^3}{3c^2 g_i}\sum_{m_i,m_f}|\langle f_A;m_f|\hat{\vec{x}}|i_A;m_i\rangle|^2 .$$

Folglich ist $\tau := \langle\Gamma_{fi}\rangle^{-1}$.

Beispiel: Wasserstoffähnliches Atom; $|f_A\rangle = |1s\rangle$ $(n=1,\ l=0)$;
$|i_A\rangle = |2p\rangle$ $(n=2,\ l=1,\ m=\pm1,0;\ g_i=3)$.

QT I: In der Ortsdarstellung gilt (in Radialkoordinaten)

$$\langle \vec r | n l m\rangle = R_{nl}(r)\, Y_{lm}(\theta,\varphi)$$

$$\langle \vec r | 1s\rangle = R_{10}(r)\, Y_{00}(\theta,\varphi) \quad ; \quad R_{10} = 2\left(\frac{Z}{a}\right)^{3/2} e^{-\frac{Zr}{a}} \quad ; \quad Y_{00} = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}$$

$$\langle \vec r | 2pm\rangle = R_{21}(r)\, Y_{1m}(\theta,\varphi) \quad ; \quad R_{21} = \frac{1}{2\sqrt6}\left(\frac{Z}{a}\right)^{5/2} r\, e^{-\frac{Zr}{2a}} \ ;$$

$$Y_{10} = \sqrt{\frac{3}{4\pi}}\cos\theta \ ;$$

$$Y_{1\pm1} = \mp\sqrt{\frac{3}{8\pi}}\sin\theta\, e^{\pm i\varphi} .$$

Wegen Drehsymmetrie wird erwartet, dass (nach $\sum_m$) alle kartesischen Komponenten denselben Beitrag liefern:

$$\sum_m |\langle 1s|\hat{\vec x}|2pm\rangle|^2 = 3\sum_m |\langle 1s| z |2pm\rangle|^2 \quad ; \quad z = r\cos\theta$$

Weil z keine Abhängigkeit von φ enthält, trägt nur $m=0$ bei:

$$\int_0^{2\pi} d\varphi \int_{-1}^{+1} d(\cos\theta)\ Y_{00}\cdot\cos\theta\cdot Y_{10} = \frac{\sqrt3}{2}\int_{-1}^{+1} d(\cos\theta)\,(\cos\theta)^2 = \frac{\sqrt3}{2}\cdot\left[\frac{(\cos\theta)^3}{3}\right]_{-1}^{+1} = \frac{1}{\sqrt3} .$$

Insgesamt also:

$$\sum_m |\langle 1s|\hat{\vec x}|2pm\rangle|^2 = 3\left|\frac{1}{\sqrt3}\int_0^\infty dr\, r^2\, R_{10}(r)\cdot r\cdot R_{21}(r)\right|^2 .$$

Radialintegral:

$$\int_0^\infty dr\, r^4\, 2\left(\frac{Z}{a}\right)^{3/2}\frac{1}{2\sqrt6}\left(\frac{Z}{a}\right)^{5/2} e^{-\frac{3Zr}{2a}} \underset{r=\hat r\cdot\frac{2a}{3Z}}{=} \frac{1}{\sqrt6}\left(\frac{2}{3}\right)^5\frac{a}{Z}\underbrace{\int_0^\infty d\hat r\, \hat r^4 e^{-\hat r}}_{4!}$$

$$= \frac{1}{\sqrt6}\left(\frac23\right)^5\frac{a}{Z}\cdot 4\cdot3\cdot2 = \frac{1}{\sqrt6}\cdot\frac{2^8}{3^4}\cdot\frac{a}{Z}$$

$$\Rightarrow \langle\Gamma_{fi}\rangle = \frac{4\alpha_{em}\omega_k^3}{3c^2}\cdot\frac{1}{\underset{g_i}{3}}\cdot\frac{a^2}{Z^2}\cdot\frac{2^{15}}{3^9} = \frac{\alpha_{em}\,\omega_k^3}{c^2}\,\frac{a^2}{Z^2}\cdot\frac{2^{17}}{3^{11}}$$

Numerisch: $Z=1$; $a = 0{,}53\,Å = 5{,}3\times10^{-11}\,m$; $\alpha_{em} = \frac{1}{137}$; $c = 3\times10^8\frac{m}{s}$

$$\hbar\omega_k = 13{,}6\,eV\cdot\left(\frac{1}{1^2}-\frac{1}{2^2}\right) = 10{,}2\,eV$$

$$\hbar = 1{,}05\times10^{-34}\,Js \quad ; \quad eV = 1{,}602\times10^{-19}\,J$$

$$\Rightarrow \omega_k = 1{,}56\times10^{16}\,\frac1s$$

$$\left(\Rightarrow \text{Wellenlänge} = \frac{2\pi}{k} = \frac{2\pi c}{\omega_k} = 120\,nm \gg a\right)$$

$$\langle\Gamma_{fi}\rangle = \frac{1}{137}\times\frac{(1{,}56\times10^{16}\,\frac1s)^3}{(3{,}0\times10^8\,\frac ms)^2}\times(5{,}3\times10^{-11}\,m)^2\times\frac{2^{17}}{3^{11}} = 6{,}3\times10^8\,\frac1s$$

$$\Rightarrow \tau = 1{,}6\times10^{-9}\,s$$