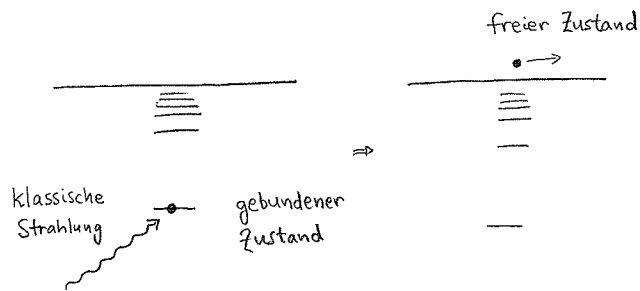


6.3 Wechselwirkung mit Atomen

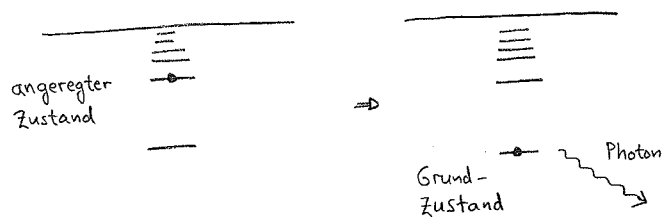
[Münster 19.3-4]

Kapitel 1.3 / Aufgabe 2.3: Photoeffekt:



Wechselwirkung =: $\hat{V} \approx -\frac{q}{mc} \vec{A}(\vec{x}, t) \cdot \hat{\vec{p}}$
 $\hookrightarrow Z_{fi}^{abs} = \frac{4\pi^2 q^2}{m^2 \omega c} |\langle f_{\mathbb{I}} | e^{i\vec{k} \cdot \vec{x}} \vec{e}_\lambda \cdot \hat{\vec{p}} | i_{\mathbb{I}} \rangle|^2 \delta(E_f - E_i - \hbar\omega)$

Jetzt: „umgekehrt“: Spontane Emission:



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

$$\hat{V} = -\frac{q}{2mc} \sum_j [\hat{p}_j, \hat{A}_j] - \frac{q}{mc} \hat{\vec{A}} \cdot \hat{\vec{p}} + \frac{q^2}{2mc^2} \hat{\vec{A}}^2 + q\phi$$

Aufgabe 19.3: $i\hbar \nabla \cdot \hat{\vec{A}} = 0$ **Effekt** "O($q^2 \hat{\vec{A}}^2$)" spielt keine Rolle in der "Strahlungsgleichung"

* Im Dirac-Bild (Seite 89):

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

Würfelnormierung $\int \frac{d^3 \vec{k}}{L^3} \sum_{\vec{k}} \frac{1}{\sqrt{2\omega_{\vec{k}}}} \sum_{\lambda} \left\{ \dots \right\}$

* Fermis goldene Regel (Seiten 8, 12; Aufgabe 2.2):

$$\Gamma_{fi} = \frac{2\pi}{\hbar} \delta(E_f - E_i \pm \hbar\omega_{\vec{k}}) |\langle f_{\mathbb{I}} | \hat{V} | i_{\mathbb{I}} \rangle|^2$$

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

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

Würfelnormierung: $\vec{k} = \frac{2\pi}{L} \vec{n}$, $\vec{n} \in \mathbb{Z}^3$
 $\hookrightarrow dN = dn_x dn_y dn_z = \left(\frac{L}{2\pi}\right)^3 dk_x dk_y dk_z \approx \left(\frac{L}{2\pi}\right)^3 k^2 dk d\Omega_{\vec{k}}$
 $E_{\gamma} = \hbar\omega_{\vec{k}} = \hbar ck \Rightarrow dk = \frac{dE_{\gamma}}{\hbar c}$
 $\hookrightarrow \frac{dN}{dE_{\gamma}} = \left(\frac{L}{2\pi}\right)^3 \frac{k^2}{\hbar c} d\Omega_{\vec{k}}$

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

Zerfallsamplitude:

$|i_I\rangle := |i_A\rangle \otimes |0\rangle$
 ↳ keine Photonen
 ↳ Anfangszustand des Atoms

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

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

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

Dipolnäherung:

Wie auf Seite 18:

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

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

Differenzielle Zerfallsrate:

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

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

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

Dimensionen: $\frac{1}{s^3} \cdot \frac{1}{m^2} \cdot m^2 = \frac{1}{s}$ 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 $\langle f_A | \hat{x} | i_A \rangle =: \vec{C}$ ein komplexer Vektor. Es gilt:

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

Aufgabe 12.1: $\sum_{\lambda} (\hat{e}_{\vec{k},\lambda}^*)_{j,i} (\hat{e}_{\vec{k},\lambda})_{i,j} = \delta_{ij} - \frac{k_i k_j}{k^2}$

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

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

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

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

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

Insgesamt:

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

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

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

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

Beispiel:

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

QMI: In der Ortsdarstellung gilt (in Radialkoordinaten)

$$\langle f | nlm \rangle = R_{nl}(r) Y_{lm}(\theta, \varphi)$$

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

$$\langle f | 2pm \rangle = R_{21}(r) Y_{1m}(\theta, \varphi) ; R_{21} = \frac{1}{2\sqrt{6}} \left(\frac{Z}{a}\right)^{5/2} r e^{-\frac{Zr}{2a}} ;$$

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

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

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

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

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

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

Insgesamt also:

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

Radialintegral:

$$\int_0^\infty dr r^4 2 \left(\frac{Z}{a}\right)^{3/2} \frac{1}{2\sqrt{6}} \left(\frac{Z}{a}\right)^{5/2} e^{-\frac{3Zr}{2a}} = \frac{1}{\sqrt{6}} \left(\frac{Z}{a}\right)^5 \frac{a}{Z} \int_0^\infty dr r^4 e^{-\frac{3r}{2a}}$$

$$r = \hat{r} \cdot \frac{2a}{3Z}$$

$$= \frac{1}{\sqrt{6}} \left(\frac{Z}{a}\right)^5 \frac{a}{Z} \cdot 4 \cdot 3 \cdot 2 = \frac{1}{\sqrt{6}} \cdot \frac{Z^8}{3^4} \cdot \frac{a}{Z}$$

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

Numerisch: $Z=1$; $a = 0,53 \text{ \AA} = 5,3 \times 10^{-11} \text{ m}$; $\alpha_{em} = \frac{1}{137}$; $c = 3 \times 10^8 \frac{\text{m}}{\text{s}}$

$$\hbar \omega_k = 13,6 \text{ eV} \cdot \left(\frac{1}{12} - \frac{1}{2^2}\right) = 10,2 \text{ eV}$$

$$\hbar = 1,05 \times 10^{-34} \text{ Js} ; \text{ eV} = 1,602 \times 10^{-19} \text{ J}$$

$$\hookrightarrow \omega_k = 1,56 \times 10^{16} \frac{1}{\text{s}}$$

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

$$\langle \Gamma_{fi} \rangle = \frac{1}{137} \times \frac{(1,56 \times 10^{16} \frac{1}{\text{s}})^3}{(3,0 \times 10^8 \frac{\text{m}}{\text{s}})^2} \times (5,3 \times 10^{-11} \text{ m})^2 \times \frac{2^{17}}{3^{11}} = 6,3 \times 10^8 \frac{1}{\text{s}}$$

$$\hookrightarrow \tau = 1,6 \times 10^{-9} \text{ s}$$

Bemerkung: $\Delta E \Delta t \sim \hbar$ (vgl. Seite 8)
 $\hbar \approx 6,6 \times 10^{-16} \text{ eVs}$; $\Delta t \sim \tau \sim 1,6 \times 10^{-9} \text{ s}$
 $\Rightarrow \Delta E \sim 4,1 \times 10^{-7} \text{ eV} \ll 13,6 \text{ eV} \cdot \frac{1}{2^2}$