
11. ÜBUNG ZUR QUANTENMECHANIK II

Abgabe der schriftlichen Aufgaben: 18.1.2008
Besprechung der Präsenzaufgaben: 21.1.2008

P/S 28 Dipolübergänge im Wasserstoffatom (20 Punkte: 8 P, 12 S)

Wir betrachten ein Wasserstoffatom mit Hamiltonoperator $\mathbf{H}_0 = \vec{\mathbf{P}}^2/(2m) - e^2/r$ in einem zeitabhängigen elektromagnetischen Feld. Wir nehmen an, daß das relevante Feld als eine Wellenfront beschrieben werden kann, die sich in eine vorgegebene Richtung $\vec{n} = c\vec{k}/\omega$ ausbreitet, d. h. mit $\vec{k}_\omega = \vec{n}\omega/c$

$$\vec{A}(\vec{x}, t) = \int d\omega \vec{A}_0(\omega) \left(e^{i(\vec{k}_\omega \cdot \vec{x} - \omega t)} + e^{-i(\vec{k}_\omega \cdot \vec{x} - \omega t)} \right). \quad (1)$$

Im folgenden soll die Coulomb-Eichung $\nabla \cdot \vec{A} = 0$ gewählt werden.

- (a/P) Geben Sie den Hamiltonoperator des Atoms im elektromagnetischen Feld an und bestimmen Sie die Wechselwirkung $\mathbf{H}'(t)$ mit dem elektromagnetischen Feld in erster Ordnung in \vec{A} .
- (b/P) Zeigen Sie, daß in der sog. Langwellennäherung $\vec{k}_\omega \cdot \vec{x} \ll 1$ die Wechselwirkung $\mathbf{H}'(t)$ für den Fall der Absorption die Form

$$\mathbf{H}'(t) = \frac{i}{\hbar c} \int d\omega e^{-i\omega t} [\vec{\mathbf{d}}, \mathbf{H}_0] \cdot \vec{A}_0(\omega) \quad (2)$$

hat, wobei $\vec{\mathbf{d}} = -e\vec{x}$ der Dipoloperator ist. Diese Form ist dann die Wechselwirkung in der sog. Dipolnäherung. Zeigen Sie, daß die Dipolnäherung für Übergänge von atomaren Systemen im Bereich sichtbaren Lichts gültig ist.

Hinweis: Beachten Sie, daß $[\vec{\mathbf{d}}, \mathbf{H}_0] = -ie\hbar\vec{\mathbf{P}}/m$ (warum?).

Die Übergangswahrscheinlichkeit zwischen zwei Zuständen $|i\rangle$ und $|f\rangle$ ist gegeben durch

$$W_{fi} = \frac{1}{\hbar^2} \left| \int_{-\infty}^{+\infty} dt e^{i\omega_{fi}t} \langle f | \mathbf{H}'(t) | i \rangle \right|^2, \quad (3)$$

wobei $\omega_{fi} = (E_f - E_i)/\hbar$.

(c/S) Leiten Sie die Auswahlregeln für Dipolübergänge (sog. E1-Übergänge, E steht für elektrisch) aus dem Grundzustand her für den Fall, daß \vec{A} in z -Richtung liegt, $\vec{A}_0(\omega) = (0, 0, A_0(\omega))$

Hinweis: Betrachten Sie dazu die Matrixelemente von $[\mathbf{d}_z, \mathbf{H}_0]$ zwischen dem Grundzustand ψ_{100} und anderen Wasserstoffeigenzuständen ψ_{nlm} , die sich darstellen lassen als $\psi_{nlm}(\vec{x}) = R_{nl}(r)Y_{lm}(\theta, \phi)$. Nutzen Sie dann Ihre Kenntnisse der Kugelflächenfunktionen für die Auswertung der Winkelintegration.

(d/P) Zeigen Sie, daß mit $\mathbf{H}'(t)$ aus (b) für die Übergangswahrscheinlichkeit folgt (mit $z = x_3$):

$$W_{fi} = \left(\frac{e}{\hbar c}\right)^2 \left(\frac{2\pi}{\hbar}\right)^2 |A_0(\omega_{fi})|^2 |\langle f | [z, \mathbf{H}_0] | i \rangle|^2. \quad (4)$$

(e/S) Berechnen Sie W_{fi} für den $1s \rightarrow 2p$ - und für den $1s \rightarrow 3p$ -Übergang im Wasserstoffatom. Vergleichen Sie die Übergangswahrscheinlichkeiten unter der Annahme, daß $A_0(\omega_{21}) = A_0(\omega_{31})$.

Hinweis: Die relevanten radialen Wasserstoffwellenfunktionen sind mit dem Bohrschen Radius a gegeben durch:

$$R_{1s}(r) = 2 a^{-3/2} \exp\left(-\frac{r}{a}\right) \quad (5)$$

$$R_{2p}(r) = \frac{1}{2\sqrt{6}} a^{-3/2} \frac{r}{a} \exp\left(-\frac{r}{2a}\right) \quad (6)$$

$$R_{3p}(r) = \frac{8}{27\sqrt{6}} a^{-3/2} \frac{r}{a} \left(1 - \frac{r}{6a}\right) \exp\left(-\frac{r}{3a}\right). \quad (7)$$

Außerdem gilt

$$\int_0^\infty dx x^n \exp\left(-\frac{x}{b}\right) = n! b^{n+1}. \quad (8)$$

S 29 Summenregel von Thomas-Reiche-Kuhn (optional, +6 Punkte)

Die sog. Oszillatorstärke ist mit den Bezeichnungen aus Aufg. 28 definiert als

$$f_{ni} = \frac{2m}{\hbar e^2} \omega_{ni} |\langle n | \mathbf{d}_z | i \rangle|^2. \quad (9)$$

Sie beschreibt die Absorptionswahrscheinlichkeit eines Photons am Wasserstoffatom.

(a) Zeigen Sie

$$\sum_n f_{ni} = \frac{m}{\hbar^2 e^2} \langle i | [[\mathbf{d}_z, \mathbf{H}_0], \mathbf{d}_z] | i \rangle. \quad (10)$$

(b) Beweisen Sie die Summenregel für die Oszillatorstärken $\sum_n f_{ni} = 1$.

Hinweis: Beachten Sie einen früheren Hinweis.

Weitere Informationen unter:

<http://www.thphys.uni-heidelberg.de/~ewerz/qm2-0708.html>