Quantenmechanik II. Musterlösung 4.

FS 11

1. Anregung eines Atoms durch ein geladenes Teilchen

i) Die Entwicklung des Coulomb-Potentials für $|\vec{x}'| \gg |\vec{x}|$ ist

$$\frac{1}{|\vec{x}' - \vec{x}|} = \frac{1}{|\vec{x}'|} - \frac{\vec{x}' \cdot \vec{x}}{|\vec{x}'|^3} + \dots$$

und mit $\vec{x}' = \vec{x}(t)$, $\vec{x} = \vec{x}_k$ folglich

$$H_1(t) = \frac{Nqe}{|\vec{x}(t)|} - q\frac{\vec{x}(t) \cdot \vec{D}}{|\vec{x}(t)|^3} + \dots \tag{6}$$

für $|\vec{x}(t)| \gtrsim a$, wobei $\vec{D} = \sum_{k=1}^{N} e\vec{x}_k$ das Dipolmoment des Atoms ist. Der erwähnte Ausdruck ist $W_{1\leftarrow 0} = \hbar^{-2}|I|^2$ mit

$$I = \int_{-\infty}^{\infty} dt\, \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega_{10}t} \langle\psi_1|H_1(t)|\psi_0\rangle \ .$$

Der erste Term der Entwicklung (6) ist $\propto \mathbb{1}$; er trägt somit nicht zu I bei. Im zweiten ist $\vec{x}(t) = b\vec{e} + v\vec{e}_0 t$, also $\vec{x}(t)^2 = b^2 + v^2t^2$. So wird

$$I = q \int_{-\infty}^{\infty} dt\, \mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega_{10}t} \frac{b\langle\psi_1|\vec{D} \cdot \vec{e}|\psi_0\rangle + vt\langle\psi_1|\vec{D} \cdot \vec{e}_0|\psi_0\rangle}{(b^2 + v^2t^2)^{3/2}} \tag{7}$$

ii) Der Integrand ist von Bedeutung für $v|t| \lesssim b$, also $\omega_{10}|t| \lesssim \omega_{10}b/v$. Unter der Annahme der Aufgabe ist dies $\ll 1$, also $\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega_{10}t} \approx 1$ und

$$I = q \int_{-\infty}^{\infty} dt\, \frac{b\langle\psi_1|\vec{D} \cdot \vec{e}|\psi_0\rangle}{(b^2 + v^2t^2)^{3/2}} = \frac{q}{bv}\langle\psi_1|\vec{D} \cdot \vec{e}|\psi_0\rangle \int_{-\infty}^{\infty} \frac{ds}{(1 + s^2)^{3/2}} = \frac{2q}{bv}\langle\psi_1|\vec{D} \cdot \vec{e}|\psi_0\rangle \ ,$$

wobei der zweite Teil des Integranden in (7) ungerade wird und somit keinen Beitrag liefert. Dies zeigt (1).

Für $\omega_{10} \gg v/b$ oszilliert die Phase in (7) rasch und es kommt zur gegenseitigen Auslöschung der Beiträge benachbarter Zeiten t. Das Integral nimmt folglich rasch mit b ab. Für $b \lesssim a$ ist zwar (6) unzulässig, aber der mittlere minimale Abstand des Projektils zu den Elektronen bleibt $\gtrsim a$. Dies begrenzt die anscheinliche Divergenz von (1) für $b \to 0$.

iii) Die Rate der Teilchen, die im Abstand $(b, b + db)$ mit $\vec{b}$ in Richtung $(\varphi, \varphi + d\varphi)$ zum Atom anfliegen ist $Nb\,db\,d\varphi$. Dem entspricht die Übergangsrate

$$\Gamma_{1\leftarrow 0} = N \int_0^{\infty} b\,db \int_0^{2\pi} d\varphi\, W_{1\leftarrow 0}(b\vec{e}) = 2\pi N \int_0^{\infty} b\,db\, \langle W_{1\leftarrow 0}(b\vec{e})\rangle \ .$$

Nach obiger Diskussion sind nur die Beiträge $a \lesssim b \lesssim v/\omega_{10}$ wesentlich, was mit (1) und

$$\int_a^{v/\omega_{10}} \frac{db}{b} = \log\Big(\frac{v}{a\omega_{10}}\Big)$$

das Ergebnis (2) liefert. Auf die genauen Vorfaktoren von a bzw. v/ω_{10} kommt es für $v/\omega_{10} \gg a$ wegen des Logarithmus nicht an.

2. Dipol-Summenregel

i) Der Übergang $0 \to n$ geht aus Energieerhaltung einher mit einer absorbierten Energie $E_n - E_0 = \hbar\omega_{n0}$. Also ist

$$\text{absorbierte Leistung} = u(\omega) \sum_{n|\omega_{n0}\in[\omega,\omega+\Delta\omega]} \frac{4\pi^2}{\hbar^2} |\langle\psi_n|\vec{D}\cdot\vec{e}|\psi_0\rangle|^2 \cdot \hbar\omega_{n0} \ ,$$

$$\text{einfallende Energiestromdichte} = cu(\omega)\Delta\omega \ ,$$

und damit

$$\begin{aligned} \sigma_{\text{abs}}(\omega)\Delta\omega &= \frac{4\pi^2}{\hbar c} \sum_{n|\omega_{n0}\in[\omega,\omega+\Delta\omega]} \omega_{n0}|\langle\psi_n|\vec{D}\cdot\vec{e}|\psi_0\rangle|^2 \\ &= \frac{4\pi^2}{\hbar c} \int_\omega^{\omega+\Delta\omega} d\omega' \sum_n \omega_{n0}|\langle\psi_n|\vec{D}\cdot\vec{e}|\psi_0\rangle|^2 \delta(\omega-\omega_{n0}) \ , \end{aligned} \tag{8}$$

was Gl. (4) entspricht. Bei der Emission $0 \to n$ ist in (3) und in der umgesetzten Energie ω_{n0} durch ω_{0n} (> 0) zu ersetzen, und so im Resultat (4). Wegen $\omega_{0n} = -\omega_{n0}$ ist

$$\sigma_{\text{em}}(\omega) = -\frac{4\pi^2}{\hbar c} \sum_n \omega_{n0}|\langle\psi_n|\vec{D}\cdot\vec{e}|\psi_0\rangle|^2 \delta(\omega+\omega_{n0}) \ .$$

Beachte, dass $\sigma_{\text{em}}(\omega) = 0$, falls $|\psi_0\rangle$ der Grundzustand ist, da dann nebst $\omega > 0$ auch $\omega_{n0} > 0$.

ii) Mit $\int_0^\infty (\delta(\omega-\omega_{n0}) + \delta(\omega+\omega_{n0}))d\omega = 1$ folgt

$$\int_0^\infty \sigma(\omega)\, d\omega = \frac{4\pi^2}{\hbar c} \sum_n \omega_{n0}|\langle\psi_n|\vec{D}\cdot\vec{e}|\psi_0\rangle|^2 \ .$$

Dem Hinweis folgend berechnen wir für

$$H = \sum_{i=1}^N \frac{\vec{p_i}^{\,2}}{2m} + V(\vec{x}_1,\ldots,\vec{x}_N) \ , \qquad \vec{D} = \sum_{k=1}^N e\vec{x}_k \ :$$

$$[H, \vec{D}\cdot\vec{e}] = \frac{e}{2m} \sum_{i,k=1}^N [\vec{p_i}^{\,2}, \vec{x}_k\cdot\vec{e}] = \frac{e}{2m} \sum_{i=1}^N [\vec{p_i}^{\,2}, \vec{x}_i\cdot\vec{e}] = -\mathrm{i}\frac{e}{m} \sum_{i=1}^N \vec{p}_i\cdot\vec{e} \ ,$$

unter Verwendung, dass für ein Teilchen

$$[\vec{p}^{\,2}, \vec{x}\cdot\vec{e}] = \sum_{i=1}^{3} [p_i^2, \vec{x}\cdot\vec{e}] = \sum_{i=1}^{3} p_i[p_i, \vec{x}\cdot\vec{e}] + [p_i, \vec{x}\cdot\vec{e}]p_i = -2\mathrm{i}\hbar\vec{p}\cdot\vec{e}\;;$$

sowie

$$\big[[H, \vec{D}\cdot\vec{e}], \vec{D}\cdot\vec{e}\big] = -\mathrm{i}\frac{e^2\hbar}{m}\sum_{i=1}^{N}[\vec{p_i}\cdot\vec{e}, \vec{x}_i\cdot\vec{e}] = -\frac{e^2\hbar^2}{m}N\;.$$

Andererseits ist

$$\begin{aligned}
&\langle\psi_0|\big[[H, \vec{D}\cdot\vec{e}], \vec{D}\cdot\vec{e}\big]|\psi_0\rangle \\
&\qquad = \sum_n \langle\psi_0|\big[H, \vec{D}\cdot\vec{e}\big]|\psi_n\rangle\langle\psi_n|\vec{D}\cdot\vec{e}|\psi_0\rangle - \langle\psi_0|\vec{D}\cdot\vec{e}|\psi_n\rangle\langle\psi_n|\big[H, \vec{D}\cdot\vec{e}\big]|\psi_0\rangle \\
&\qquad = \sum_n \big((E_0 - E_n) - (E_n - E_0)\big)\langle\psi_0|\vec{D}\cdot\vec{e}|\psi_n\rangle\langle\psi_n|\vec{D}\cdot\vec{e}|\psi_0\rangle \\
&\qquad = -2\sum_n \hbar\omega_{n0}|\langle\psi_n|\vec{D}\cdot\vec{e}|\psi_0\rangle|^2\;.
\end{aligned}$$

Demzufolge ist die Summe in (8) gleich $e^2\hbar N/2m$, und (5) folgt.