Fakultät für Physik
C. Ewerz

Universität Bielefeld
Wintersemester 2007/08

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 $\vec{k}_\omega = \vec{n}\,\omega/c$

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

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

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

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

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

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 $z = x_3$):

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

(e/S) Berechnen Sie W_{fi} für den 1s→2p- und für den 1s→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:

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

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

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

Außerdem gilt

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

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

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

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

Sie beschreibt die Absorptionswahrscheinlichkeit eines Photons am Wasserstoffatom.

(a) Zeigen Sie

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

(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