Quantenmechanik II. Übung 5.

FS14 *Abgabe:* Di 1. April 2014

1. Dipol-Summenregel

Die Rate für einen Übergang von einem Zustand $|\psi_0\rangle$ (nicht notwendigerweise der Grundzustand) zu einem anderen $|\psi_n\rangle$ infolge Absorption von elektromagnetischer Strahlung ist in 1. Ordnung Störungsrechnung

$$\Gamma^{\mathrm{abs}}_{n\leftarrow 0} = u(\omega_{n0})\frac{4\pi^2}{\hbar^2}|\langle\psi_n|\vec{D}\cdot\vec{e}|\psi_0\rangle|^2 \ , \tag{1}$$

wobei $\hbar\omega_{n0} = E_n - E_0$ und $u(\omega)$ die spektrale Energiedichte der Strahlung bei der Frequenz ω (> 0) ist. Falls die Polarisation linear ist, d.h. $\vec{e}$ reell, wie fortan angenommen, so gilt die selbe Formel für die (stimulierte) Emissionsrate $\Gamma^{\mathrm{em}}_{n\leftarrow 0}$, bis auf $\omega_{0n} > 0$ anstelle von ω_{n0}. (Die umgesetzten Energien $\hbar\omega_{n0}$, $\hbar\omega_{0n}$ sind die des beteiligten Photons, was aber bei der klassischen Beschreibung des Felds übersehen wird.) Definiere den Streuquerschnitt für Absorption als

$$\sigma_{\mathrm{abs}}(\omega) = \frac{\text{absorbierte e.m. Leistung}}{\text{einfallende Energiestromdichte}} \ ,$$

wobei sich Zähler und Nenner auf Strahlung im Frequenzintervall $[\omega, \omega + \Delta\omega]$, $(\Delta\omega \to 0)$ beziehen. Analog für $\sigma_{\mathrm{em}}(\omega)$.

i) Zeige

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

und finde den analogen Ausdruck für $\sigma_{\mathrm{em}}(\omega)$.

ii) Setze $\sigma(\omega) := \sigma_{\mathrm{abs}}(\omega) - \sigma_{\mathrm{em}}(\omega)$ (Vorzeichen: Absorption schwächt die Strahlung, Emission verstärkt sie) und leite die Dipol-Summenregel her:

$$\int_0^\infty \sigma(\omega)d\omega = \frac{2\pi^2 e^2}{mc}N \ , \tag{3}$$

wobei N die Anzahl Elektronen des Atoms ist.

Hinweis: Berechne

$$\langle\psi_0|\big[[H, \vec{D}\cdot\vec{e}], \vec{D}\cdot\vec{e}\big]|\psi_0\rangle$$

einerseits durch Verwendung der Basis $|\psi_n\rangle$, andererseits durch Berechnung der Kommutatoren (vgl. Aufgabe 4.1(i) der QM I). Von welcher allgemeinen Form ist H?

Nebenbei: Eine verwandte Summenregel in der alten Quantentheorie (Thomas-Reiche-Kuhn Summenregel) war bei der Entdeckung der Matrizenmechanik durch Heisenberg von Bedeutung.

2. Goldene Regel und Bornsche Näherung

Anhand des Hamilton-Operators

$$H = \frac{\vec{p}^2}{2m} + V(\vec{x}) \equiv H_0 + H_1$$

auf $L^2(\mathbb{R}^3)$ soll die Streuung eines Teilchens vom Impuls $\hbar\vec{k}_0 = \hbar k\vec{e}_0$ am Potential $V(\vec{x})$ beschrieben werden.

i) Zeige, dass der differentielle Streuquerschnitt für Streuung in Richtung $\vec{e}$ in der Bornschen Näherung (5.13) umgeschrieben werden kann als

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{m^2}{4\pi^2\hbar^4}|\hat{V}(\vec{q})|^2 \,, \tag{4}$$

wobei $\hbar\vec{q} = \hbar k(\vec{e} - \vec{e}_0)$ der Impulsübertrag ist, und $\hat{V}(\vec{q}) = \int \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\vec{q}\cdot\vec{y}} V(\vec{y}) d^3y$.

Die Goldene Regel, symbolisch

$$\Gamma = \frac{2\pi}{\hbar}|M|^2\rho \,,$$

kann mittels Kontinuumszuständen ausgewertet werden oder, um deren Tücken zu umgehen, mittels eines Quasi-Kontinuums von orthonormierten Zuständen. Matrixelemente M, Zustandsdichte ρ und unter Umständen selbst Raten Γ hängen von dieser Wahl ab, nicht aber messbare Grössen wie

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{\text{Streustrom in das Winkelelement } \Delta\Omega}{\Delta\Omega \times \text{einfallende Stromdichte}} \,. \tag{5}$$

Dies soll im folgenden gezeigt werden. Dabei ist Γ der erwähnte Streustrom.

ii) Wie sind die Kontinuumszustände $|\vec{k}\rangle$,

$$\langle\vec{x}|\vec{k}\rangle \propto \mathrm{e}^{\mathrm{i}\vec{k}\cdot\vec{x}} \,, \qquad (\vec{k} \in \mathbb{R}^3) \,,$$

zu normieren, damit $\langle\vec{k}'|\vec{k}\rangle = \delta(\vec{k}' - \vec{k})$? Berechne die Energie $E(k)$,

$$H_0|\vec{k}\rangle = E(k)|\vec{k}\rangle \,, \qquad (\vec{k} = k\vec{e}) \,,$$

die Zustandsdichte

$$\rho(E) = \int_{\vec{e}\in\Delta\Omega} d^3k\, \delta(E(k) - E) \,, \tag{6}$$

das Matrixelement $M = \langle\vec{k}|H_1|\vec{k}_0\rangle$, sowie die einfallende Stromdichte von $|\vec{k}_0\rangle$. Bestätige damit (4).

iii) Um mit orthonormierten Zuständen arbeiten zu können, ersetze $\mathbb{R}^3 \ni \vec{x}$ durch ein Quantisierungsvolumen, und zwar einen Würfel Λ vom Volumen $|\Lambda|$ mit periodischen Randbedingungen. Folglich wird $\vec{k}$ quantisiert. Berechne die Zustandsdichte $\rho(E)$ mittels

$$\rho(E)\Delta E = \#\{\vec{k} = k\vec{e} \mid |E(k) \in [E, E + \Delta E], \vec{e} \in \Delta\Omega\} \,, \tag{7}$$

sowie die weiteren in (ii) erwähnten Grössen, um damit (4) erneut zu bestätigen.