Prof. Dr. Andreas Knorr
Dr. Marten Richter, Dipl. Phys. Julia Kabuß, Wassilij Kopylov, MSc.

9. Übungsblatt – Theoretische Physik V: Quantenmechanik II

Abgabe: Bis Do. 16.01.2014 8:25 vor Beginn der Vorlesung im EW 203

Bei den schriftlichen Ausarbeitungen werden ausführliche Kommentare zum Vorgehen erwartet. Dafür gibt es auch Punkte! Bitte das Tutorium und den Namen des Tutors auf dem Aufgabenzettel angeben! Die Abgabe erfolgt in maximal Vierergruppen.

Aufgabe 13 (10 Punkte): *Übergangswahrscheinlichkeiten*

Der Dipoloperator ist, analog zur klassischen Physik, definiert über $\hat{\mathbf{d}} = q\hat{\mathbf{r}}$, wobei q für die Ladung steht. Betrachten Sie in dieser Aufgabe ein Wasserstoffatom im elektrischen Feld $\mathbf{E}$, dessen Zustand mithilfe der Quantenzahlen n, l, m beschrieben ist durch $|n, l, m\rangle$.

(a) Berechnen Sie die folgenden Dipolmatrixelemente:

   (i) $\langle 2, 1, 0|\hat{\mathbf{d}}|1, 0, 0\rangle$
   (ii) $\langle 2, 1, \pm 1|\hat{\mathbf{d}}|1, 0, 0\rangle$
   (iii) $\langle 2, 0, 0|\hat{\mathbf{d}}|1, 0, 0\rangle$

   Hinweise:

   – Benutzen Sie dazu die Ortsdarstellung mithilfe von aus QM 1 bekannten Radial- und Kugelflächenfunktionen $\langle \mathbf{r}|nlm\rangle = R_{nl}(r)Y_{lm}(\theta, \phi)$.
   – Stellen Sie den Ortsoperator $\hat{\mathbf{r}}$ mithilfe der Kugelkoordinaten dar. Drücken Sie dann den Winkelanteil mithilfe der Kugelflächenfunktionen $Y_{l,m}$ aus.
   – Benutzen Sie die Orthonormierung der Kugelflächenfunktionen, d.h. $\int d\Omega Y^*_{l,m}(\theta, \phi)Y_{l',m'}(\theta, \phi) = \delta_{l,l'}\delta_{m,m'}$.

(b) Wir möchten nun die Dipol-Auswahlregeln für beliebige Zustände des Wasserstoffatom ableiten, also untersuchen, wann im Allgemeinen ein Matrixelement der Form $\langle n'l'm'|\hat{\mathbf{d}}\cos(\theta)|nlm\rangle \neq 0$ ist. Hier bei ist θ der Winkel zwischen dem Dipolmoment $\hat{\mathbf{d}}$ und dem externen elektrischen Feld $\mathbf{E}$.

   (i) Drücken Sie dazu $\cos(\theta)\, Y_{l,m}(\theta, \varphi)$ als Linearkombination von Kugelflächenfunktionen mit den von l, m-abhängigen Vorfaktoren aus (Ergebnis: $\cos(\theta)\, Y_{l,m} = \sqrt{\frac{l^2-m^2}{4l^2-1}} Y_{l-1,m} + \sqrt{\frac{(l+1)^2-m^2}{4(l+1)^2-1}} Y_{l+1,m}$).
   Tipps: Benutzen Sie dafür folgende Rekursionsbeziehung für assoziierte Legendre-Polynome: $(2l + 1)xP_l^{(m)}(x) = (l + m)P_{l-1}^m(x) + (l - m + 1)P_{l+1}^{(m)}(x)$ sowie den Zusammenhang zwischen den Kugelflächenfunktionen $Y_{l,m}$ und $P_l^{(m)}$.
   (ii) Bestimmen Sie einen allg. Ausdruck für das Dipolmatrixelement $\langle n', l', m'|\hat{\mathbf{d}}\cos(\theta)|n, l, m\rangle$ Wann sind die Übergänge erlaubt bzw. verboten?
   (iii) Erstellen Sie auf Grundlage von (ii) eine übersichtliche Skizze aller Übergänge für $n \in 1, 2, 3$ und diskutieren Sie die Ergebnisse.
   (iv) Man findet auch folgende Auswahlregel: $\Delta l = 0, \pm 2$. Warum kommt diese aus unserer Rechnung nicht raus?

9. Übung TPV WS13/14

Aufgabe 14 (10 Punkte): *Strahlungsdämpfung der Dipoldichte*

Wir betrachten ein Atom mit zwei Niveaus, dass an das Photonenfeld im Vakuum im Volumen L^3 koppelt. Es wird durch den folgenden Hamiltonoperator beschrieben:

$$H = \varepsilon_1 a_1^\dagger a_1 + \varepsilon_2 a_2^\dagger a_2 + \sum_{k\lambda} \hbar\omega_{k\lambda} c_{k\lambda}^\dagger c_{k\lambda} + \sum_{k\lambda} g_{12}^{k\lambda} c_{k\lambda}^\dagger a_1^\dagger a_2 + \sum_{k\lambda} g_{21}^{k\lambda *} c_{k\lambda} a_2^\dagger a_1 \tag{1}$$

mit den elektronischen Erzeuger und Vernichtern $a^\dagger, a$ mit ihren Energien $\varepsilon_1, \varepsilon_2$ mit $\varepsilon_2 > \varepsilon_1$, den photonischen Erzeuer und Vernichtern $c^\dagger, c$ und ihrer Frequenz $\omega_{k\lambda}$ sowie der Elektron Photon-kopplung $g_{12}^{k\lambda} = \imath \left(\frac{\hbar\omega_k}{2\varepsilon_0 L^3}\right)^{\frac{1}{2}} \mathbf{d}_{12} \cdot \mathbf{e}_{k,\lambda}$. Dabei ist $\mathbf{d}_{12}$ das Dipolmoment des Übergangs zwischen Niveau 1 und 2 und $\mathbf{e}_{k,\lambda}$ die Polarisationsrichtung der Photonmode.

1. Vollziehen Sie die Berechnung der Bewegungsgleichung für $\langle a_1^\dagger a_2 \rangle$ aus der Vorlesung nach. Sie erhalten:

$$\partial_t \langle a_1^\dagger a_2 \rangle = \frac{\imath}{\hbar}(\varepsilon_1 - \varepsilon_2)\langle a_1^\dagger a_2 \rangle + \frac{\imath}{\hbar} \sum_{k\lambda} g_{21}^{k\lambda *} (\langle c_{k\lambda} a_1^\dagger a_1 \rangle - \langle c_{k\lambda} a_2^\dagger a_2 \rangle). \tag{2}$$

2. Stellen Sie auch die Bewegungsgleichungen für $\langle c_{k\lambda} a_1^\dagger a_1 \rangle$ und $\langle c_{k\lambda} a_2^\dagger a_2 \rangle$ auf. Führen Sie analog zum letzten Übungszettel eine Badannahme für die Photonen durch. Lösen Sie die Gleichungen in Markovnäherung, Sie erhalten (mit $n_{k\lambda} = \langle c_{k\lambda}^\dagger c_{k\lambda} \rangle$):

$$\langle c_{k\lambda} a_1^\dagger a_1 \rangle = -\frac{\imath}{\hbar^2} g_{12}^{k\lambda} \frac{n_{k\lambda} + 1}{-\imath(\omega_{\hbar\lambda k} + \varepsilon_1/\hbar - \varepsilon_2/\hbar) + \gamma_0 \hbar} \langle a_1^\dagger a_2 \rangle \tag{3}$$

$$\langle c_{k\lambda} a_2^\dagger a_2 \rangle = \frac{\imath}{\hbar^2} g_{12}^{k\lambda} \frac{n_{k\lambda}}{-\imath(\omega_{\hbar\lambda k} + \varepsilon_1/\hbar - \varepsilon_2/\hbar) + \gamma_0 \hbar} \langle a_1^\dagger a_2 \rangle, \tag{4}$$

wobei eine Konvergenz erzeugende Zerfallskonstante γ_0 eingefügt wurde. Hinweis: $\langle a_1^\dagger a_2 \rangle$ ist eine schnell oszillierende Größe, diese muß für die Markovnäherung in eine langsam oszillierende Größe umgewandelt werden, z.B. $\langle a_1^\dagger a_2 \rangle(t') = e^{-\frac{\imath}{\hbar}(\varepsilon_1 - \varepsilon_2)(t-t')} \widetilde{\langle a_1^\dagger a_2 \rangle}(t')$, wobei $\widetilde{\langle a_1^\dagger a_2 \rangle}$ eine langsame Größe ist.

3. Setzen Sie die Ergebnisse aus dem letzten Aufgabenteil für den Fall, dass die spontane Emission dominiert ($n_{k\lambda} \approx 0$) in die Gleichung für $\langle a_1^\dagger a_2 \rangle$ ein, sie erhalten:

$$\partial_t \langle a_1^\dagger a_2 \rangle = \frac{\imath}{\hbar}(\varepsilon_1 - \varepsilon_2)\langle a_1^\dagger a_2 \rangle - \gamma_{sp} \langle a_1^\dagger a_2 \rangle \tag{5}$$

mit $\gamma_{sp} = \sum_{k\lambda} \frac{|g_{12}^{k\lambda}|^2}{\hbar^2} \pi \delta(\omega_{k\lambda} - \omega_0)$ wobei $\omega_0 = (\varepsilon_2 - \varepsilon_1)/\hbar$.

4. Zeigen Sie, dass $\gamma_{sp} = \frac{|d_{12}|^2}{3\pi 2 \varepsilon_0 \hbar} \left(\frac{\omega_0}{c}\right)^3$. Wie groß ist der Zerfall im Vergleich zum radiativen Zerfall einer Dichte wie in der Vorlesung diskutiert? Warum sind Auswahlregeln auch für den radiativen Zerfall wichtig?