

Vorlesung 16

Periodische Störungen

Es passiert oft, dass wir eine Störung betrachten, die periodisch in der Zeit ist. Wir werden solche Störungen hier diskutieren. Als Störpotential nehmen wir

$$V(t) = V e^{-i\omega t} + V^\dagger e^{i\omega t} \quad (1)$$

an, weil $V(t)$ hermitesch sein muss. Die Übergangsamplitude ist dann

$$a_{fi} = -\frac{i}{\hbar} \int_{-T/2}^{T/2} dt' e^{i\omega_{fi}t'} \langle f | \hat{V}(t') | i \rangle = -\frac{1}{\hbar} \left[\frac{\langle f | V | i \rangle}{\omega_{fi} - \omega} \left(e^{i(\omega_{fi} - \omega)\frac{T}{2}} - e^{-i(\omega_{fi} - \omega)\frac{T}{2}} \right) + \frac{\langle f | V^\dagger | i \rangle}{\omega_{fi} + \omega} \left(e^{i(\omega_{fi} + \omega)\frac{T}{2}} - e^{-i(\omega_{fi} + \omega)\frac{T}{2}} \right) \right]. \quad (2)$$

Man sieht, dass diese Übergangsamplitude relativ groß ist, wenn entweder $\omega = \omega_{fi}$ oder $\omega = -\omega_{fi}$. Den ersten Fall bezeichnen wir als "Absorption von ω -Quanten", den zweiten als Abstrahlung von ω -Quanten.

Wir betrachten den ersten Term in Gl. (2) und schreiben die Wahrscheinlichkeit als

$$|a_{fi}(T)|^2 = \frac{4|V_{fi}|^2}{\hbar^2(\omega_{fi} - \omega)^2} \sin^2 \frac{(\omega_{fi} - \omega)T}{2}. \quad (3)$$

Was passiert mit dieser Formel im Limes $t \rightarrow \infty$? Um diese Frage zu beantworten, es ist nützlich die folgende Formel zu kennen

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \frac{\sin^2(\xi t)}{\xi^2 t} = \pi \delta(\xi). \quad (4)$$

Um diese Formel zu prüfen, können wir beide Seiten über ξ integrieren. Auf der rechten Seite bekommen wir π ; auf der linken Seite erhalten wir

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx \frac{\sin^2(xt)}{x^2 t} = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dy}{y^2} \sin^2 y = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dy}{y} 2 \sin y \cos y = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dy}{y} \sin y = \pi. \quad (5)$$

Dazu haben wir die Variablentransformation $y = xt$ gemacht und partielle Integration genutzt. Wir stellen außerdem fest, dass

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \frac{\sin^2(\xi t)}{\xi^2 t} \quad (6)$$

überall gegen Null strebt, außer bei $\xi = 0$. D.h.

$$\lim_{T \rightarrow \infty} |a_{fi}(T)|^2 = \frac{2\pi |\langle f | V | i \rangle|^2}{\hbar^2} T \delta(\omega_{fi} - \omega). \quad (7)$$

Wir sehen, dass die Übergangswahrscheinlichkeit proportional zur Länge des Zeitintervalls ist. Die Bedeutung der δ -Funktion in dieser Formel ist die Energieerhaltung.

Einen anderen Weg, diese Formel herzuleiten, bietet die Möglichkeit in der Berechnung von a_{fi} von Anfang an den Limes $t \rightarrow \infty$ zu nehmen. Dann

$$a_{fi}(\infty) = -\frac{i}{\hbar} \left[\langle f|V|i\rangle 2\pi \delta(\omega_{fi} - \omega) + \langle f|V^\dagger|i\rangle 2\pi \delta(\omega_{fi} + \omega) \right]. \quad (8)$$

Wir nehmen, wie vorher, nur den ersten Term und erhalten

$$|a_{fi}(\infty)|^2 = \frac{|\langle f|V|i\rangle|^2}{\hbar^2} |2\pi \delta(\omega_{fi} - \omega)|^2. \quad (9)$$

Eine δ -Funktion quadriert ist nicht vollständig definiert. Um das zu klären, schreiben wir

$$\begin{aligned} (2\pi\delta(\omega_{fi} - \omega))^2 &= 2\pi\delta(\omega_{fi} - \omega) \int_{-T/2}^{T/2} dt e^{i(\omega_{fi} - \omega)t} \\ &= 2\pi\delta(\omega_{fi} - \omega) \int_{-T/2}^{T/2} dt = 2\pi\delta(\omega_{fi} - \omega)T, \end{aligned} \quad (10)$$

sodass

$$|a_{fi}(\infty)|^2 = \frac{2\pi|\langle f|V|i\rangle|^2}{\hbar^2} \delta(\omega_{fi} - \omega)T. \quad (11)$$

Mit dieser Formel kann man die Übergangswahrscheinlichkeit pro Zeiteinheit berechnen

$$\frac{W_{fi}}{T} = \frac{|a_{fi}(\infty)|^2}{T} = \frac{2\pi|\langle f|V|i\rangle|^2}{\hbar^2} \delta(\omega_{fi} - \omega). \quad (12)$$

Diese Gleichung nennt man auch "Fermis goldene Regel."

Es gibt auch die Situation, in der ein Übergang in Zustände des kontinuierlichen Spektrums erfolgt. Dann müssen wir schreiben

$$\frac{dW_{fi}}{T} = \frac{|a_{fi}(\infty)|^2}{T} = \frac{2\pi|\langle f|V|i\rangle|^2}{\hbar^2} \delta(\omega_{fi} - \omega) d\nu_f, \quad (13)$$

wobei $d\nu_f$ die Zustandsdichte ist.

Um die Zustandsdichte für ein Teilchen zu berechnen, betrachten wir das Teilchen in einer Box mit periodische Randbedingungen. Die Wellenfunktion ist

$$\psi = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}, \quad k_i = \frac{2\pi n_i}{L_i}, \quad i = x, y, z, \quad (14)$$

womit wir folgende Zustandsdichte erhalten:

$$\Delta n_x \Delta n_y \Delta n_z = \frac{L_x dk_x}{(2\pi)} \frac{L_y dk_y}{(2\pi)} \frac{L_z dk_z}{(2\pi)} = \frac{V d^3\vec{k}}{(2\pi)^3}. \quad (15)$$

Die δ -Funktion in der Fermi-Regel beschränkt die Energie. Deswegen es ist nützlich, die Zustandsdichte durch die Energie auszudrücken. Weil $E_f = \hbar^2 \vec{k}^2 / (2m)$ ist, erhalten wir

$$dE_f = \frac{\hbar^2}{m} k dk \Rightarrow dk = \frac{m}{\hbar^2 k} dE_f. \quad (16)$$

Daraus ergibt sich

$$d\nu_f = \frac{V d^3 \vec{k}}{(2\pi)^3} = \frac{V \vec{k}^2 dk d\Omega_{\vec{k}}}{(2\pi)^3} = \frac{V km}{\hbar^2} dE_f \frac{d\Omega_{\vec{k}}}{(2\pi)^3} = \frac{V \sqrt{2mE_f} m}{\hbar^3} dE_f \frac{d\Omega_{\vec{k}}}{(2\pi)^3}. \quad (17)$$

Durch Kombination dieser Formel mit der Fermi-Regel erhalten wir

$$\frac{dW_{fi}}{T} \sim \delta(E_f - E_i - \omega) d\nu_f \sim \delta(E_f - E_i - \omega) dE_f. \quad (18)$$

Wenn wir diese Formel über E_f integrieren, verschwindet die δ -Funktion. Wir werden zu guter Letzt sehen, dass die Übergangswahrscheinlichkeiten pro Zeit- und Einheitsvolumen wichtig sind. Für diese Größe verschwinden dann alle Normierungsfaktoren.

Wir wollen jetzt zeigen, wie man die Fermi-Regel benutzen kann. Wir werden die Streuung eines geladenen Teilchens an einem Atom diskutieren. Die Wechselwirkung unseres Teilchens mit den geladenen Teilchen in Atom beschreiben wir mit der potentiellen Energie

$$V(\vec{r}) = \sum_a \frac{e_0 e_a}{|\vec{r} - \vec{r}_a|}, \quad (19)$$

wobei \vec{r} der Ortsvektor unseres Teilchens mit der Ladung e_0 und \vec{r}_a die Ortsvektoren der geladenen Teilchen im Atom mit der Ladung e_a sind.

$V(\vec{r})$ ist zeitunabhängig. Das entspricht $\omega = 0$, sodass

$$\frac{dW_{fi}}{T} = \frac{|\langle f | V | i \rangle|^2}{\hbar} 2\pi \delta(E_f - E_i) d\nu_f. \quad (20)$$

Unser Anfangszustand ist

- die einlaufende ebene Welle $\psi_i = 1/\sqrt{V} e^{i\vec{p}_i \cdot \vec{r}}$,
- das Atom im Zustand $|i_A\rangle$.

Unser Endzustand ist

- die auslaufende ebene Welle $\psi_f = 1/\sqrt{V} e^{i\vec{p}_f \cdot \vec{r}}$;
- das Atom im Zustand $|f_A\rangle$.

Die Energieerhaltung lautet

$$0 = E_f - E_i = E_{f_A} - E_{i_A} + \frac{\vec{p}_f^2}{2m} - \frac{\vec{p}_i^2}{2m} = E_{f_A} - E_{i_A} - T_i + T_f, \quad (21)$$

wobei $T_a = \vec{p}_a^2/(2m)$ ist. Dann benutzen wir Gl. (17) mit $E_f \rightarrow T_f$ und erhalten nach der Integration über die Energie

$$\delta(E_f - E_i)d\nu_f \rightarrow \frac{Vm}{\hbar^3} \sqrt{2mT_f} \frac{d\Omega_{\vec{k}}}{(2\pi)^3}, \quad (22)$$

wobei die kinetische Energie des auslaufendes Teilchens

$$T_f = \frac{\vec{p}_f^2}{2m} = E_{i_A} + T_i - E_{f_A} \quad (23)$$

fixiert ist.

Als zweiten Baustein brauchen wir das Matrixelement $V_{fi} = \langle f|V|i\rangle$. Es lautet (unter Verwendung von $\vec{q} = \vec{p}_i - \vec{p}_f$)

$$\begin{aligned} V_{fi} &= \frac{1}{V} \langle f_A | \int d^3\vec{r} e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}} \sum_a \frac{e_0 e_a}{|\vec{r} - \vec{r}_a|} |i_A\rangle = \frac{1}{V} \langle f_A | \sum_a \int d^3\vec{r} e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}} \frac{e_0 e_a}{|\vec{r} - \vec{r}_a|} |i_A\rangle \\ &= \frac{1}{V} \langle f_A | \sum_a e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}_a} \int d^3\vec{r} e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}} \frac{e_0 e_a}{|\vec{r}|} |i_A\rangle = \frac{4\pi e_0^2}{Vq^2} \langle f_A | \sum_a e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}_a} e_0^{-1} e_a |i_A\rangle \end{aligned} \quad (24)$$

Wir merken an, dass wir während der Herleitung die Variablentransformation $\vec{r}' \rightarrow \vec{r}' + \vec{r}_a$ gemacht haben, und die folgende Formel benutzt haben

$$\int d^3\vec{r}' \frac{e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}'}}{r} = \frac{4\pi}{q^2}. \quad (25)$$

Das letzte Matrixelement in Gl. (24) nennen wir “atomarer Formfaktor”

$$F_{f_A i_A}(\vec{q}) = \langle f_A | \sum_a e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}_a} e_0^{-1} e_a |i_A\rangle. \quad (26)$$

Der Formfaktor ist eine Funktion des Impulsübertrags sowie der Anfangs- und Endzustände des Atoms.

Für die Übergangswahrscheinlichkeit bekommen wir

$$\frac{dW_{fi}}{T} = \frac{2\pi Vm}{\hbar^4} \sqrt{2mT_f} \frac{d\Omega_{\vec{p}_f}}{(2\pi)^3} \left| \frac{4\pi e_0^2}{q^2 V} F_{f_A i_A}(\vec{q}) \right|^2 = \frac{4e_0^4 m}{\hbar^4 V (q^2)^2} \sqrt{2mT_f} d\Omega_{\vec{p}_f} |F_{f_A i_A}(\vec{q})|^2. \quad (27)$$

Die Übergangswahrscheinlichkeit können wir nicht direkt messen. Dementsprechend definieren wir den Wirkungsquerschnitt als

$$d\sigma = \frac{dW_{fi}/T}{J}, \quad (28)$$

wobei J der Strom ist. Für eine einlaufende ebene Welle ist der Strom

$$J = \frac{p_i}{mV}, \quad (29)$$

und wir erhalten ($\sqrt{2mT_f} = p_f$)

$$\frac{d\sigma}{d\Omega_{\vec{p}_f}} = \frac{4e_0^4 m^2}{\hbar^4 (\vec{q}^2)^2} \frac{p_f}{p_i} |F_{f_A i_A}(\vec{q})|^2. \quad (30)$$

Wir können jetzt mit Hilfe dieser Formel verschiedene Situationen betrachten, z.B. elastische $|f_a\rangle \neq |i_a\rangle$ und inelastische $|f_a\rangle = |i_a\rangle$ Streuung.

In dieser Vorlesung werden wir nur über die elastische Streuung am Wasserstoffatom im Grundzustand reden. Dann gilt $|f_a\rangle = |i_a\rangle = |1s\rangle$ und $p_f = p_i$. Um den Vorfaktor zu berechnen, brauchen wir

$$F(\vec{q}) = \langle 1s | e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}} - 1 | 1s \rangle = \langle 1s | e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}} | 1s \rangle - 1. \quad (31)$$

Der Term -1 ist der Beitrag des Protons, weil $\vec{r}_a = 0$, $e_p/e_0 = -1$. Die Wellenfunktion des $1s$ Zustandes ist

$$\psi_{1s}(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{\pi a_B^3}} e^{-r/a_B}. \quad (32)$$

D.h.

$$\begin{aligned} \langle 1s | e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}} | 1s \rangle &= \frac{1}{\pi a_B^3} \int d^3\vec{r} e^{-2r/a_B} e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}} = \frac{2\pi}{\pi a_B^3} \int_0^\infty dr r^2 e^{-2r/a_B} \frac{1}{iqr} (e^{iqr} - q^{-iqr}) \\ &= \frac{2\pi}{\pi a_B^3 i q} \int_0^\infty dr r (e^{-2r/a_B + iqr} - e^{-2r/a_B - iqr}) = \frac{1}{(1 + q^2 a_B^2/4)^2}, \end{aligned} \quad (33)$$

wobei wir benutzt haben, dass

$$\int_0^\infty dr r e^{-\lambda r} = \frac{1}{\lambda^2} \quad (34)$$

ist.

Der Vorfaktor ist dann

$$F(\vec{q}) = \frac{1}{(1 + q^2 a_B^2/4)^2} - 1. \quad (35)$$

Der Vorfaktor hat einige wichtige Eigenschaften, die wir hier kurz diskutieren wollen. Bei $\vec{q} = 0$ ist der elastische Vorfaktor gleich der totalen Ladung des Atoms. Dies folgt direkt aus der Definition. Für das Wasserstoffatom bekommen wir

$$F(\vec{q})|_{\vec{q} \rightarrow 0} \approx -\frac{\vec{q}^2 a_B^2}{2} + \dots, \quad (36)$$

weil die Wechselwirkung zwischen Elektron und Proton sich gegenseitig weghebt. Die Größe

$$r_q^2 = \frac{dF(\vec{q}^2)}{d\vec{q}^2}|_{\vec{q}^2=0} \quad (37)$$

nennt man den quadrierten Ladungsradius. Der Ladungsradius charakterisiert die Raumverteilung der Ladungsdichte in Atomen. Wir sehen, dass im Wasserstoffatom der Ladungsradius durch den Bohrradius gegeben ist.

In dem anderen Limit, $q \rightarrow \infty$, erhalten wir

$$F(\vec{q}) + 1 \sim \frac{1}{a_B^4 q^4}. \quad (38)$$