

Vorlesung 18

Spontane Abstrahlung, Multipolentwicklung

Wir betrachten das Wasserstoffatom im $2P$ -Zustand. Falls wir ein Wasserstoffatom in Isolation betrachten, ist der $2P$ -Zustand stabil. Wie wir aber schon wissen, wechselwirkt ein geladenes Teilchen mit Photonen und kann das Vakuum anregen. Das kann dazu führen, dass ein $2P$ -Zustand in einen $1S$ -Zustand und ein Photon zerfällt, d.h. zu einem Prozess

$$2P \rightarrow 1S + \gamma. \quad (1)$$

Wir werden jetzt diesen Prozess genau analysieren. Die Anzahl von Photonen hat sich von Null auf eins erhöht. Die Formeln, die diese Situation beschreiben, haben wir in Vorlesung 17 hergeleitet. Wir schreiben dann die Übergangswahrscheinlichkeit pro Zeiteinheit mit Hilfe von Fermis Goldener Regel als

$$\frac{d\omega_{fi}}{T} = \frac{2\pi}{\hbar} |\langle f | -\frac{e}{mc} \vec{p} \cdot \vec{A}(t=0, \vec{r}) | i \rangle|^2 \delta(E_f - E_i) d\nu_f. \quad (2)$$

Jetzt nehmen wir $|i\rangle = |2P\rangle$, $|f\rangle = |1S\rangle \otimes |\vec{k}, \lambda\rangle$ und schreiben

$$E_f = E_{1S} + \hbar\omega_k, \quad E_i = E_{2P}, \quad d\nu_f = \frac{V d^3\vec{k}}{(2\pi)^3}. \quad (3)$$

Dann

$$\langle f | -\frac{e}{mc} \vec{p} \cdot \vec{A}(t=0, \vec{r}) | i \rangle = \mathcal{N} \frac{-e}{mc} \langle 1S | \vec{p} \cdot \vec{\epsilon}_{\vec{k}, \lambda}^* e^{-i\vec{k} \cdot \vec{r}} | 2P, m_z \rangle, \quad (4)$$

wobei m_z der Eigenwert der z -Komponente des Drehimpulses ist und $\mathcal{N} = \sqrt{\frac{2\pi\hbar c^2}{\omega_{\vec{k}} V}}$ der Normierungsfaktor.

Die Energieerhaltung ergibt die Energie des Photons

$$\hbar\omega_k = E_{2P} - E_{1S}. \quad (5)$$

Weil $\omega_k = |\vec{k}|c$ ist, liegt der Betrag von \vec{k} auch fest; die Richtung des abgestrahlten Photons ist aber beliebig.

Wir müssen jetzt das Matrixelement in Gl. (4) berechnen. Wir können die Berechnung stark vereinfachen, wenn wir ausnutzen, dass $e^{-i\vec{k} \cdot \vec{r}} \approx 1$ ist. Die Idee ist, $\vec{k} \cdot \vec{r}$ abzuschätzen. Wir wissen, dass

$$\vec{k} \cdot \vec{r} \approx |\vec{k}| a_B \sim \frac{\omega_k}{c} a_B \sim \frac{E_{2P} - E_{1S}}{\hbar c} a_B \sim \frac{mc^2 \alpha^2}{\hbar c} a_B \sim \alpha \frac{mc \alpha}{\hbar} a_B \sim \alpha \ll 1. \quad (6)$$

Das heißt, dass wir $e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}}$ in $\vec{k} \cdot \vec{r}$ entwickeln können. Den ersten Term erhalten wir, indem wir $e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}}$ durch 1 ersetzen. Damit haben wir das folgende Matrixelement zu berechnen

$$A = \mathcal{N} \frac{-e}{mc} \vec{\epsilon}_{\vec{k}, \lambda}^* \cdot \langle 1S | \vec{p} | 2P, m_z \rangle. \quad (7)$$

Wir schreiben

$$\vec{p} = \frac{im}{\hbar} [H, \vec{r}], \quad (8)$$

wobei H der Hamiltonoperator des Wasserstoffatoms ist, sodass

$$\begin{aligned} A &= \mathcal{N} \frac{-ei}{c\hbar} \vec{\epsilon}_{\vec{k},\lambda}^* \cdot \langle 1S|[H, \vec{r}]|2P, m_z \rangle = \mathcal{N} \frac{-ei(E_{1S} - E_{2P})}{c\hbar} \vec{\epsilon}_{\vec{k},\lambda}^* \cdot \langle 1S|\vec{r}|2P, m_z \rangle \\ &= \mathcal{N} \frac{ei\omega_k}{c} \vec{\epsilon}_{\vec{k},\lambda}^* \cdot \langle 1S|\vec{r}|2P, m_z \rangle = \mathcal{N} \frac{i\omega_k}{c} \vec{\epsilon}_{\vec{k},\lambda}^* \cdot \langle 1S|e\vec{r}|2P, m_z \rangle \\ &= \mathcal{N} \frac{i\omega_k}{c} \vec{\epsilon}_{\vec{k},\lambda}^* \cdot \langle 1S|\vec{d}|2P, m_z \rangle. \end{aligned} \quad (9)$$

In obiger Herleitung haben wir $H|1S\rangle = E_{1S}|1S\rangle$, $H|2P\rangle = E_{2P}|2P\rangle$ und $E_{1S} - E_{2P} = -\hbar\omega_k$ benutzt. Wir sehen, dass das Übergangsmatrixelement proportional zum Matrixelement des elektrischen Dipoloperators ist. Deswegen spricht man auch vom elektrischen Dipolübergang ($E1$).

Wir berechnen die Übergangswahrscheinlichkeit für einen gegebenen Polarisationszustand λ und erhalten

$$\frac{d\omega_{fi}^\lambda}{T} = \frac{\omega_k^3}{2\pi c^3 \hbar} d\Omega_k |\vec{\epsilon}_{\lambda, \vec{k}}^* \cdot \vec{d}_{fi}|^2. \quad (10)$$

Wir können jetzt über die Polarisierungen des Photons summieren. Dazu benutzen wir

$$\sum_{\lambda} \vec{d}_{fi}^{*\alpha} \vec{d}_{fi}^{\beta} \epsilon_{\lambda, \vec{k}; \beta}^* \epsilon_{\lambda, \vec{k}; \alpha} = \sum_{\lambda} \vec{d}_{fi}^{*\alpha} \vec{d}_{fi}^{\beta} \left(\delta_{\alpha\beta} - \frac{k_{\alpha} k_{\beta}}{k^2} \right). \quad (11)$$

Jetzt müssen wir noch den Vektor \vec{d}_{fi} berechnen. Wohin dieser Vektor zeigt, ist vom Anfangszustand abhängig. Wir fangen an mit $|2P, m_z = 0\rangle$. Dann

$$\begin{aligned} \langle 1S|\vec{r}|2P, m_z = 0\rangle &= \vec{e}_z \langle 1S|z|2P, m_z = 0\rangle \\ &= \vec{e}_z \langle 1S|r\sqrt{\frac{4\pi}{3}} Y_{10}(\theta, \phi)|2P, m_z = 0\rangle = \frac{\vec{e}_z}{\sqrt{3}} \int_0^{\infty} r^2 dr r \Psi_{1S}(r) \Psi_{2P}(r), \end{aligned} \quad (12)$$

wobei $\Psi_{1S}(r), \Psi_{2P}(r)$ die radialen Wellenfunktionen der $1S$ und $2P$ Zustände sind; sie sehen so aus

$$\Psi_{1S}(r) = \sqrt{\frac{4}{a_B^3}} e^{-r/a_B}, \quad \Psi_{2P}(r) = \sqrt{\frac{1}{24a_B^3}} \frac{r}{a_B} e^{-r/(2a_B)}. \quad (13)$$

Wir betrachten dann $m_z = +1$. Dann

$$\begin{aligned} \langle 1S|\vec{r}|2P, m_z = 1\rangle &= \frac{\vec{e}_x + i\vec{e}_y}{\sqrt{2}} \langle 1S|\frac{x - iy}{\sqrt{2}}|2P, m_z = 1\rangle \\ &= -\vec{e}_+ \langle 1S|\sqrt{\frac{4\pi}{3}} Y_{1,1}^*(\theta, \phi)|2P, m_z = 1\rangle = -\frac{\vec{e}_+}{\sqrt{3}} \int_0^{\infty} r^2 dr r \Psi_{1S}(r) \Psi_{2P}(r). \end{aligned} \quad (14)$$

Das Ergebnis für $|2P, m_z = -1\rangle$ ist dann offensichtlich

$$\langle 1S | \vec{r} | 2P, m_z = 1 \rangle = \frac{\vec{e}_-}{\sqrt{3}} \int_0^\infty r^2 dr r \Psi_{1S}(r) \Psi_{2P}(r). \quad (15)$$

Wir berechnen jetzt Gl. (11) für verschiedene Anfangszustände. Für $|2P, m_z = 0\rangle$ bekommen wir

$$\vec{d}_{fi}^{*,\alpha} \vec{d}_{fi}^\beta \left(\delta_{\alpha\beta} - \frac{k_\alpha k_\beta}{\vec{k}^2} \right) = \frac{e^2 W^2}{3} e_z^\alpha e_z^\beta \left(\delta_{\alpha\beta} - \frac{k_\alpha k_\beta}{\vec{k}^2} \right) = \frac{e^2 W^2}{3} \sin^2 \theta_k, \quad (16)$$

wobei $\vec{k} = k(\sin \theta_k \cos \phi_k, \sin \theta_k \sin \phi_k, \cos \theta_k)$ ist und

$$W = \int_0^\infty r^2 dr r \Psi_{1S}(r) \Psi_{2P}(r). \quad (17)$$

Für $|2P, m_z = 1\rangle$ haben wir

$$\vec{d}_{fi}^{*,\alpha} \vec{d}_{fi}^\beta \left(\delta_{\alpha\beta} - \frac{k_\alpha k_\beta}{\vec{k}^2} \right) = \frac{e^2 W^2}{3} e_+^\alpha e_-^\beta \left(\delta_{\alpha\beta} - \frac{k_\alpha k_\beta}{\vec{k}^2} \right) = \frac{e^2 W^2}{3} \frac{(1 + \cos^2 \theta_k)}{2}. \quad (18)$$

Das Ergebnis für $|2P, m_z = -1\rangle$ ist identisch.

Wir berechnen W , bekommen

$$W = \frac{a_B}{\sqrt{6}} \frac{2^8}{3^4}, \quad (19)$$

und setzen alle obigen Ergebnisse in die Formel für die Übergangswahrscheinlichkeit ein. Das Endergebnis lautet

$$\frac{d\bar{w}_{fi}}{T} = \frac{\omega_k^3}{2\pi c^3 \hbar} \frac{e^2 a_B^2}{3^{10}} 2^{15} d\Omega_k \begin{cases} \sin^2 \theta_k, & m_z = 0; \\ \frac{(1 + \cos^2 \theta_k)}{2}, & m_z = \pm 1. \end{cases} \quad (20)$$

Wir sehen, dass die Winkelverteilung der abgestrahlten Photonen von m_z abhängig ist. Falls wir den Anfangszustand nicht kennen, müssen wir über alle drei m_z -Werte mitteln. Wir erhalten

$$\begin{aligned} \frac{d\bar{w}_{fi}}{T} &= \frac{1}{3} \sum_{m_z=0,\pm 1} \frac{d\bar{w}_{fi}}{T} = \frac{\omega_k^3}{3} \frac{e^2 a_B^2}{2\pi c^3 \hbar} \frac{2^{15}}{3^{10}} d\Omega_k \left(\sin^2 \theta_k + 2 \frac{(1 + \cos^2 \theta_k)}{2} \right) \\ &= \frac{\omega_k^3}{\pi c^3 \hbar} \frac{e^2 a_B^2}{3^{11}} 2^{15} d\Omega_k, \end{aligned} \quad (21)$$

sodass in diesem Fall die Abstrahlung isotrop aussieht. Die totale Wahrscheinlichkeit pro Zeiteinheit erhalten wir nach der Integration über $d\Omega_k$. Wir bekommen

$$\frac{\bar{w}_{fi}}{T} = \frac{\omega_k^3}{c^3 \hbar} \frac{e^2 a_B^2}{3^{11}} 2^{17}. \quad (22)$$

Die Lebensdauer des 2P-Zustandes ist durch die inverse Wahrscheinlichkeit pro Zeiteinheit gegeben

$$\tau_{2P} = \frac{1}{\omega_{fi}/T}. \quad (23)$$

Wir werden jetzt τ_{2P} grob abschätzen. Wir schreiben

$$\begin{aligned} \tau_{2P} &\sim \frac{c^3 \hbar}{\omega_k^3} \frac{1}{e^2 a_B^2} \sim \frac{1}{\omega_k} \frac{c^3 \hbar^3}{(\hbar \omega_k)^2} \frac{1}{e^2 a_B^2} \\ &\sim \frac{1}{\omega_k} \frac{c^3 \hbar^3}{(e^2/a_B)^2} \frac{1}{e^2 a_B^2} \sim \frac{1}{\omega_k} \frac{c^3 \hbar^3}{e^6} \sim \frac{1}{\omega_k} \frac{1}{\alpha^3} \sim 10^8 - 10^9 \text{ sec.} \end{aligned} \quad (24)$$

Wir haben schon gesagt, dass der Mechanismus, den wir beschrieben haben, "elektrische Dipolstrahlung" heißt. Die Hauptnäherung ist $e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} \rightarrow 1$, weil $\vec{k} \cdot \vec{r}$ klein ist. Dann ist die Übergangswahrscheinlichkeit proportional zum Matrixelement $\langle f | \vec{r} | i \rangle$ und das bedeutet, dass die Bahndreihimpulse der Anfang- und Endzustände sich genau um 1 unterscheiden müssen, d.h. $L_f = L_i \pm 1$ usw. Wir haben das natürlich explizit im Fall des Wasserstoffatoms gesehen, aber das gilt auch allgemein.

Was passiert, falls die Quantenzahlen der Anfangs- und Endzustände den elektrischen Dipolübergang nicht erlauben? Wir können natürlich $e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}$ weiter in $\vec{k} \cdot \vec{r}$ entwickeln, z.B. lautet die nächste Näherung

$$e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}} \rightarrow -i\vec{k} \cdot \vec{r}. \quad (25)$$

Dann sieht das Matrixelement, das wir zu berechnen haben, so aus

$$A = \langle f | \frac{-e}{mc} \vec{p} \cdot \epsilon_{\lambda, \vec{k}}^* (-i\vec{k} \cdot \vec{r}) | i \rangle = \frac{ie}{mc} \langle f | (\vec{p} \cdot \vec{\epsilon}_{\lambda, \vec{k}}^*) (\vec{k} \cdot \vec{r}) | i \rangle. \quad (26)$$

Wir wollen jetzt dieses Matrixelement vereinfachen. Wir schreiben

$$\begin{aligned} (\vec{p} \cdot \vec{\epsilon}_{\lambda, \vec{k}}^*) (\vec{k} \cdot \vec{r}) &= \frac{1}{2} \left((\vec{p} \cdot \vec{\epsilon}_{\lambda, \vec{k}}^*) (\vec{k} \cdot \vec{r}) + (\vec{r} \cdot \vec{\epsilon}_{\lambda, \vec{k}}^*) (\vec{k} \cdot \vec{p}) \right) \\ &+ \frac{1}{2} \left((\vec{p} \cdot \vec{\epsilon}_{\lambda, \vec{k}}^*) (\vec{k} \cdot \vec{r}) - (\vec{r} \cdot \vec{\epsilon}_{\lambda, \vec{k}}^*) (\vec{k} \cdot \vec{p}) \right) = \frac{O_+ + O_-}{2}. \end{aligned} \quad (27)$$

Den Operator O_+ können wir als Kommutator zwischen H und dem Operator $\epsilon_{\lambda, \vec{k}}^* \cdot r \vec{k} \cdot \vec{r}$ schreiben. In der Tat gilt

$$[H, \epsilon_{\lambda, \vec{k}}^* \cdot r \vec{k} \cdot \vec{r}] = \left[\frac{\vec{p}^2}{2m}, \epsilon_{\lambda, \vec{k}}^* \cdot r \vec{k} \cdot \vec{r} \right] = -\frac{i\hbar}{m} O_+. \quad (28)$$

Dann

$$\begin{aligned} A_+ &= \frac{-e}{2\hbar c} \langle f | [H, \epsilon_{\lambda, \vec{k}}^* \cdot r \vec{k} \cdot \vec{r}] | i \rangle = \frac{e(E_i - E_f)}{2\hbar c} \langle f | \epsilon_{\lambda, \vec{k}}^* \cdot r \vec{k} \cdot \vec{r} | i \rangle \\ &= \frac{e(E_i - E_f)}{2\hbar c} \epsilon_{\lambda, \vec{k}}^{*\alpha} \vec{k}^\beta \langle f | r_\alpha r_\beta | i \rangle = \frac{e(E_i - E_f)}{2\hbar c} \epsilon_{\lambda, \vec{k}}^{*\alpha} \vec{k}^\beta \langle f | r_\alpha r_\beta - \frac{1}{3} \delta_{\alpha\beta} | i \rangle \\ &= \frac{(E_i - E_f)}{2\hbar c} \epsilon_{\lambda, \vec{k}}^{*\alpha} \vec{k}^\beta \langle f | Q_{\alpha\beta} | i \rangle, \end{aligned} \quad (29)$$

wobei $Q_{\alpha\beta} = e(r_\alpha r_\beta - r^2 \delta_{\alpha\beta}/3)$ der elektrische Quadrupoloperator ist. Die Übergänge, die der elektrische Quadrupoloperator induziert, nennt man $E2$ -Übergänge. Wir merken auch, dass wir, um den vorletzten Schritt in Gl. (29) zu machen, die Orthogonalität des Polarisationsvektors $\vec{\epsilon}_{\lambda,\vec{k}} \cdot \vec{k} = 0$ benutzt haben.

Das Matrixelement $\langle f|Q_{\alpha\beta}|i\rangle$ ist nur von Null verschieden, falls sich die Drehimpulse zwischen Anfangs- und Endzuständen um zwei Einheiten unterscheiden, $L_f = L_i \pm 2$. Das bedeutet z.B., dass der elektrische Quadrupoloperator nicht einen $2S \rightarrow 1S + \gamma$ Zerfall induzieren kann.

Als Nächstes schauen wir dann den O_- -Operator an. Wir schreiben

$$\begin{aligned} O_- &= (\vec{p} \cdot \vec{\epsilon}_{\lambda,\vec{k}}^*)(\vec{k} \cdot \vec{r}) - (\vec{r} \cdot \vec{\epsilon}_{\lambda,\vec{k}}^*)(\vec{k} \cdot \vec{p}) = \vec{p}_\alpha \vec{\epsilon}_{\lambda,\vec{k};\beta}^* \vec{k}_\gamma \vec{r}_\delta (\delta_{\alpha\beta} \delta_{\gamma\delta} - \delta_{\alpha\gamma} \delta_{\beta\delta}) \\ &= \vec{p}_\alpha \vec{\epsilon}_{\lambda,\vec{k};\beta}^* \vec{k}_\gamma \vec{r}_\delta \epsilon_{\rho\alpha\delta} \epsilon_{\rho\beta\gamma} = [\vec{p} \times \vec{r}] \cdot [\vec{\epsilon}_{\lambda,\vec{k}}^* \times \vec{k}] = [\vec{k} \times \vec{\epsilon}_{\lambda,\vec{k}}^*] \cdot \vec{L}. \end{aligned} \quad (30)$$

Dann,

$$A_- = \frac{ie}{2m} [\vec{k} \times \vec{\epsilon}_{\lambda,\vec{k}}^*] \cdot \langle f|\vec{L}|i\rangle. \quad (31)$$

Das bedeutet, dass wir für diesen Übergang (magnetischer Dipol oder $M1$) brauchen, dass die Drehimpulse der Anfangs- und Endzustände identisch und natürlich von Null verschieden sind. D.h., dass der magnetische Dipolübergang keinen $2S \rightarrow 1S + \gamma$ Zerfall induzieren kann.

Die höheren Multipole entsprechen der Entwicklung von $e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}$ in $\vec{k} \cdot \vec{r} \sim \alpha$. D.h. die Übergangswahrscheinlichkeit des Quadrupolübergangs oder des magnetischen Dipolübergangs ist $\mathcal{O}(\alpha^2) \sim 10^{-4}$ mal kleiner, als die Wahrscheinlichkeit des elektrischen Dipolübergangs.

Für ein Teilchen mit Spin gibt es noch eine weitere Möglichkeit, mit dem elektromagnetischen Feld zu wechselwirken. Der entsprechende Term im Hamiltonoperator ist

$$H_{\text{spin}} = -\vec{\mu} \cdot \vec{B} = -g_s \hbar \vec{s} \cdot \vec{B}. \quad (32)$$

Das magnetische Feld ist

$$\vec{B} = [\vec{\partial} \times \vec{A}(t, \vec{r})] = \sum_{\vec{k}, \lambda} i \sqrt{\frac{2\pi \hbar^2 c}{\omega_k V}} \left[a_{\lambda,\vec{k}} [\vec{k} \times \vec{\epsilon}_{\lambda,\vec{k}}] e^{-i\omega_k t + i\vec{k}\cdot\vec{r}} - a_{\lambda,\vec{k}}^\dagger [\vec{k} \times \vec{\epsilon}_{\lambda,\vec{k}}^*] e^{i\omega_k t - i\vec{k}\cdot\vec{r}} \right], \quad (33)$$

sodass falls wir die Übergangswahrscheinlichkeiten, die durch H_{spin} verursacht werden, berechnen wollen, wir genau das Gleiche machen müssen, was wir bereits am Anfang dieser Vorlesung gemacht haben. Die Übergangswahrscheinlichkeit sieht so aus

$$\frac{d\omega_{fi}}{T} = \frac{\omega_k d\Omega_k}{2\pi \hbar c} \left| \langle f|g_s \hbar [\vec{\epsilon}_{\lambda,\vec{k}}^* \times \vec{k}] \cdot \vec{s}|i\rangle \right|^2. \quad (34)$$

Weil $g_s \sim e/(mc)$ ist, ist die Stärke des Spin-Übergangs vergleichbar zu der Stärke des $M1$ -Übergangs.