

Moderne Theoretische Physik II

(Quantenmechanik II und Statistik)

Institut für Theoretische Teilchenphysik

Prof. Dr. Matthias Steinhauser, Dr. Hantian Zhang, Manuel Egner **WS 23/24 – Blatt 04**

Abgabe: Fr., 17.11.2023, 11:30 Uhr; Besprechung: Di., 21.11.2023

1 (*) Wasserstoffatom im elektrischen Feld (4 Punkte)

Betrachten Sie ein Wasserstoffatom in einem homogenen elektrischen Feld $\vec{E}(t)$, das entlang der z -Richtung liegt. Die Amplitude betrage $E(t) = A\tau/(\tau^2 + t^2)$, wobei A und τ vorgegebene Konstanten sind. Berechnen Sie die Wahrscheinlichkeit P für den Übergang des Elektrons aus dem Grundzustand (bei $t \rightarrow -\infty$) in den $2P$ -Zustand (bei $t \rightarrow +\infty$).

Hinweis:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dx \frac{e^{i\omega x}}{a^2 + x^2} = \frac{\pi}{a} e^{-|\omega|a}.$$

Solution

The electric field in the z -direction implies the Hamiltonian

$$H = H_0 + V(t) = H_0 + E(t)\vec{z}.$$

By using first-order perturbation theory, we have

$$\begin{aligned} A_{|m\rangle \rightarrow |n\rangle}(t) &= \delta_{mn} + \frac{1}{i\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} dt' e^{i(E_n - E_m)t'/\hbar} \langle n|V(t')|m\rangle \\ &= 0|_{m \neq n} + \frac{1}{i\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} dt' e^{i\omega_{nm}t'/\hbar} \frac{A\tau}{\tau^2 + t'^2} \langle n|\vec{z}|m\rangle, \end{aligned}$$

where $\omega_{nm} = (E_n - E_m)/\hbar$. Using the integration formula in the hint, we have

$$A_{|m\rangle \rightarrow |n\rangle}(t) = \frac{A\pi}{i\hbar} e^{-|\omega_{nm}|\tau} \langle n|\vec{z}|m\rangle.$$

Now take $|m\rangle = |1s\rangle$ and $|n\rangle = |2p\rangle$, we have the probability

$$P_{1s \rightarrow 2p} = |A(t)|^2 = \frac{A^2\pi^2}{\hbar^2} e^{-2|\omega|\tau} |\langle 2p|\vec{z}|1s\rangle|^2,$$

where $|\omega|_{1s \rightarrow 2p} = \left| \frac{E_2 - E_1}{\hbar} \right| = \frac{3}{4} \frac{E_1}{\hbar}$. Then we use the following wave functions for the states

$$\begin{aligned} |1s\rangle : \quad \psi_{100}(\vec{r}) &= R_{10}(r)Y_{00}(0, \phi) = \frac{2}{a_0^{3/2}} e^{-r/a_0} \frac{1}{\sqrt{4\pi}} \\ |2p, l=1\rangle : \quad \psi_{21m}(\vec{r}) &= R_{21}(r)Y_{1m}(0, \phi), \end{aligned}$$

where $m = -1, 0, 1$ and Bohr radius a_0 . Here we only need $\psi_{210}(\vec{r})$ since $Y_{1,\pm 1}(0, \phi) \propto e^{\pm i\phi}$ and $\int_0^{2\pi} d\phi e^{\pm i\phi} = 0$, then we have

$$\psi_{210} = R_{21}(r)Y_{10}(0, \phi) = \frac{1}{\sqrt{3}} \frac{1}{(2a_0)^{3/2}} \left(\frac{r}{a_0} \right) e^{-r/(2a_0)} \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \theta.$$

Now parametrise $\vec{z} = \kappa \cos \theta$, we have

$$\begin{aligned} \langle 2p|\vec{z}|1s\rangle &= \frac{1}{4\pi} \frac{a_0}{\sqrt{2}} \left[\frac{1}{a_0^4} \int_0^\infty r^3 dr \left(\frac{r}{a_0} \right) e^{-3/2(r/a_0)} \right] \int_{-1}^1 \cos^2 \theta d\cos \theta \int_0^{2\pi} d\phi \\ &= \frac{a_0}{\sqrt{2}} \frac{2^8}{3^5}, \end{aligned}$$

and the probability

$$P_{1s \rightarrow 2p} = \frac{A^2\pi^2}{\hbar^2} e^{-2\omega\tau} a_0^2 \frac{2^{15}}{3^{10}} \simeq 0.55 \frac{A^2\pi^2}{\hbar^2} e^{-2\omega\tau} a_0^2$$

2 (*) Lebensdauer für Dipolübergang (6 Punkte)

Betrachten Sie ein Wasserstoffatom, wobei sich das Elektron in einem $2P$ -Zustand mit $m = 0, +1$ oder -1 befindet. Mit Hilfe der zeitabhängigen Störungstheorie erster Ordnung erhält man für die Übergangsrate in den $1S$ -Zustand (in SI-Einheiten)

$$\frac{d\Gamma_{2P \rightarrow 1S, \vec{k}\lambda}}{d\Omega} = \frac{\alpha}{2\pi c^2} \omega^3 |\vec{d}_{2P,1S} \cdot \vec{\epsilon}_{\vec{k}\lambda}^*|^2,$$

wobei \vec{k} und λ Wellenzahl und Polarisation des Photons sind und sich ω aus der Energiedifferenz zwischen dem $2P$ - und $1S$ -Niveau ergibt.

1. Summieren Sie über beide Polarisationszustände und integrieren Sie über den Raumwinkel $d\Omega$ (des Vektors \vec{k}), um die Lebensdauer in Abhängigkeit vom Betrag des Dipolmatrixelements $|\vec{d}_{2P,1S}|$ zu bekommen.

Solution

We have

$$\Gamma_{2p \rightarrow 1s} = \sum_{\lambda} \int d\Omega \frac{d\Gamma_{2p \rightarrow 1s, \vec{k}, \lambda}}{d\Omega} , \quad \lambda = 1, 2 .$$

Now parametrise the angle with

$$\vec{d}_{1p,1s} \cdot \vec{\epsilon}_{\vec{k},1}^* = \cos \theta_1 |\vec{d}_{1p,1s}| , \quad \vec{d}_{2p,1s} \cdot \vec{\epsilon}_{\vec{k},2}^* = \cos \theta_2 |\vec{d}_{2p,1s}| ,$$

then we have

$$\Gamma_{2p \rightarrow 1s} = \int d\Omega \frac{\alpha}{2\pi c^2} \omega^3 |\vec{d}_{2p,1s}|^2 (\cos^2 \theta_1 + \cos^2 \theta_2) .$$

Now rewrite the $\cos \theta_i$ in the spherical coordinate

$$\cos \theta_1 = \sin \theta \cos \phi , \quad \cos \theta_2 = \sin \theta \sin \phi ,$$

and we have

$$\int d\Omega (\cos^2 \theta_1 + \cos^2 \theta_2) = \int_{-1}^1 d\cos \theta \sin^2 \theta \int_0^{2\pi} d\phi (\cos^2 \phi + \sin^2 \phi) = \frac{8\pi}{3} .$$

Hence we have

$$\Gamma_{2p \rightarrow 1s} = \frac{4\alpha}{3c^2} \omega^3 |\vec{d}_{2p,1s}|^2 ,$$

and the lifetime is $\tau = 1/\Gamma_{2p \rightarrow 1s}$.

2. Berechnen Sie das Dipolmatrixelement $\vec{d}_{2P,1S}$ und drücken Sie die Lebensdauer τ durch α , m_e , c und \hbar aus.

Solution

$$\vec{d}_{2p \rightarrow 1s} = \langle 1s | \vec{R} | 2p \rangle = \int r^2 dr \int d\Omega \psi_{1s}^*(\vec{r}) \psi_{2p}(\vec{r}) \vec{r}.$$

We use

$$\psi_{1s}(\vec{r}) = R_{10}(r) Y_{00}(0, \phi), \quad \psi_{2s}(\vec{r}) = R_{20}(r) Y_{1m}(0, \phi), \quad \vec{r} = r \begin{pmatrix} \sin \theta \cos \phi \\ \sin \theta \sin \phi \\ \cos \theta \end{pmatrix},$$

and

$$Y_{00} = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}, \quad Y_{10} = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \theta, \quad Y_{1,-1} = -\sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \theta e^{i\phi}, \quad Y_{11} = \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \theta e^{-i\phi},$$

then we have

$$\begin{aligned} \sin \theta \cos \phi &= \frac{1}{2} \sqrt{\frac{8\pi}{3}} (Y_{1,-1} - Y_{11}), \\ \sin \theta \sin \phi &= -\frac{1}{2i} \sqrt{\frac{8\pi}{3}} (Y_{1,-1} + Y_{11}), \quad \cos \theta = \sqrt{\frac{4\pi}{3}} Y_{10}. \end{aligned}$$

Hence we have

$$R_{10} = \frac{2}{a_0^{3/2}} e^{-\frac{r}{a_0}}, \quad R_{21} = \frac{1}{(24a_0^3)^{1/2}} \frac{r}{a_0} e^{-\frac{r}{2a_0}},$$

yielding

$$\begin{aligned} \vec{d}_{2p,1s} &= \int_0^\infty dr r^4 \frac{1}{a_0^4 \sqrt{6}} e^{-\frac{3r}{2a_0}} \int d\Omega \frac{1}{\sqrt{4\pi}} Y_{1m} \begin{pmatrix} \frac{1}{2} \sqrt{\frac{8\pi}{3}} (Y_{1,-1} - Y_{11}) \\ -\frac{1}{2i} \sqrt{\frac{8\pi}{3}} (Y_{1,-1} + Y_{11}) \\ \sqrt{\frac{4\pi}{3}} Y_{10} \end{pmatrix} \\ &= \frac{1}{a_0^4 \sqrt{6}} \frac{256 a_0^5}{81} \begin{pmatrix} \frac{1}{2} \sqrt{\frac{2}{3}} (\delta_{m,-1} - \delta_{m,1}) \\ -\frac{1}{2i} \sqrt{\frac{2}{3}} (\delta_{m,-1} + \delta_{m,1}) \\ \sqrt{\frac{1}{3}} \delta_{m,0} \end{pmatrix}. \end{aligned}$$

Hence

$$\begin{aligned} |\vec{d}_{2p,1s}|^2 &= \frac{a_0^2}{6} \left(\frac{256}{81} \right)^2 \left[\frac{1}{6} (\delta_{m,-1} + \delta_{m,1}) + \frac{1}{6} (\delta_{m,-1} + \delta_{m,1}) + \frac{1}{3} \delta_{m,0} \right] \\ &= \frac{a_0^2 2^{15}}{3^{10}} (\delta_{m,1} + \delta_{m,-1} + \delta_{m,0}). \end{aligned}$$

Now with $\omega = \frac{E_{2p} - E_{1s}}{\hbar} = \frac{\alpha^2 mc^2}{\hbar} \left(-\frac{1}{8} + \frac{1}{2} \right) = \frac{\alpha^2 mc^2}{\hbar} \frac{3}{8}$ and $a_0 = \frac{\hbar}{\alpha m c}$, we can compute the life time

$$\tau = \frac{\hbar}{\alpha^5 m c^2} \frac{3^8}{2^8}$$

3. Werten Sie τ numerisch aus. Numerische Werte für die Konstanten finden Sie auf der Webseite https://pdg.lbl.gov/2023/reviews/contents_sports.html

Solution

$$\tau = 1.595 \times 10^{-9} \text{ s}$$

3 Hamilton-Operator des freien Strahlungsfeldes

Der Hamilton-Operator des freien Strahlungsfeldes in einem endlichen Volumen V ist gegeben durch

$$\begin{aligned} H_{\text{rad}} &= \frac{\epsilon_0 c^2}{2} \int d^3r \left(\frac{\vec{E}^2}{c^2} + \vec{B}^2 \right) \\ &= \frac{V \epsilon_0 c^2}{2} \sum_{\vec{k}} \left(\frac{1}{c^2} |\dot{\vec{A}}_{\vec{k}}(t)|^2 + |\vec{k} \times \vec{A}_{\vec{k}}(t)|^2 \right), \end{aligned} \quad (1)$$

wobei $\vec{A}_{\vec{k}}(t)$ aus Gl. (2) (siehe unten) extrahiert werden kann. Zeigen Sie, dass Gl. (1) in folgender Form geschrieben werden kann

$$H_{\text{rad}} = \sum_{\vec{k}, \lambda} \hbar c k \left(\vec{a}_{\vec{k}, \lambda}^\dagger \vec{a}_{\vec{k}, \lambda} + \frac{1}{2} \right),$$

wobei \vec{k} den Wellenvektor und λ die Polarization bezeichnet. Das Vektorpotential ist dabei gegeben durch (mit $\omega_k = kc$)

$$\vec{A}(\vec{r}, t) = \sum_{\vec{k}, \lambda} \sqrt{\frac{\hbar}{2kcV\epsilon_0}} \left(a_{\vec{k}, \lambda} \vec{\varepsilon}_{\vec{k}, \lambda} e^{i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega_k t)} + a_{\vec{k}, \lambda}^\dagger \vec{\varepsilon}_{\vec{k}, \lambda}^* e^{-i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega_k t)} \right), \quad (2)$$

wobei $a_{\vec{k}, \lambda}$ und $a_{\vec{k}, \lambda}^\dagger$ die Erzeugungs- bzw. Vernichtungsoperatoren sind. Es gilt

$$[a_{\vec{k}, \lambda}, a_{\vec{k}', \lambda'}^\dagger] = \delta_{\vec{k}, \vec{k}'} \delta_{\lambda, \lambda'}, \quad [a_{\vec{k}, \lambda}, a_{\vec{k}', \lambda'}] = 0, \quad \text{und} \quad [a_{\vec{k}, \lambda}^\dagger, a_{\vec{k}', \lambda'}^\dagger] = 0.$$

Hinweis: O.B.d.A. kann man Polarisationsvektoren wählen, so dass gilt $\vec{\varepsilon}_{\vec{k}, \lambda} = \vec{\varepsilon}_{-\vec{k}, \lambda}$.

Solution

Here we need to employ a trick of integration

$$\int d^3r \left(X e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} + Y e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}} \right) = \int d^3r (X + Y) e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}},$$

since we have the freedom to change the integration variables in \vec{r} . Then we can use this trick and compare eq. (2) and $\vec{A}(\vec{r}, t) = \sum_{\vec{k}} \vec{A}_{\vec{k}}(t) e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}$ to obtain

$$\vec{A}_{\vec{k}}(t) = \sum_{\lambda} \sqrt{\frac{\hbar}{2kcV\epsilon_0}} \left(a_{\vec{k},\lambda} \vec{\varepsilon}_{\vec{k},\lambda} e^{-i\omega_k t} + a_{\vec{k},\lambda}^\dagger \vec{\varepsilon}_{\vec{k},\lambda}^* e^{i\omega_k t} \right).$$

We can employ the properties of polarisation vectors ($\lambda = 1, 2$)

$$\vec{\varepsilon}_1 \cdot \vec{\varepsilon}_2 = 0, \quad \vec{\varepsilon}_1 \times \vec{\varepsilon}_2 = \frac{\vec{k}}{|\vec{k}|}, \quad |\vec{\varepsilon}_i| = 1, \quad \frac{\vec{k}}{|\vec{k}|} \times \vec{\varepsilon}_1 = \vec{\varepsilon}_2, \quad \frac{\vec{k}}{|\vec{k}|} \times \vec{\varepsilon}_2 = -\vec{\varepsilon}_1,$$

and obtain the followings

$$\begin{aligned} \dot{\vec{A}}_{\vec{k}}(t) &= \sum_{\lambda} \sqrt{\frac{\hbar}{2kcV\epsilon_0}} \left(a_{\vec{k},\lambda} \vec{\varepsilon}_{\vec{k},\lambda} (-i\omega_k) e^{-i\omega_k t} + a_{\vec{k},\lambda}^\dagger \vec{\varepsilon}_{\vec{k},\lambda}^* (i\omega_k) e^{i\omega_k t} \right) \\ \vec{k} \times \vec{A}_{\vec{k}}(t) &= \sqrt{\frac{\hbar}{2kcV\epsilon_0}} \left[\left(a_{\vec{k},1} |\vec{k}| \vec{\varepsilon}_{\vec{k},2} e^{-i\omega_k t} + a_{\vec{k},1}^\dagger |\vec{k}| \vec{\varepsilon}_{\vec{k},2}^* e^{i\omega_k t} \right) \right. \\ &\quad \left. - \left(a_{\vec{k},2} |\vec{k}| \vec{\varepsilon}_{\vec{k},1} e^{-i\omega_k t} + a_{\vec{k},2}^\dagger |\vec{k}| \vec{\varepsilon}_{\vec{k},1}^* e^{i\omega_k t} \right) \right]. \end{aligned}$$

With $\vec{\varepsilon}_1 \cdot \vec{\varepsilon}_2 = 0$ and $|\vec{\varepsilon}_i| = 1$, we further have

$$\begin{aligned} |\dot{\vec{A}}_{\vec{k}}|^2 &= \sum_{\lambda} \frac{\hbar}{2kcV\epsilon_0} \left[\omega_k^2 \left(a_{\vec{k},\lambda} a_{\vec{k},\lambda}^\dagger + a_{\vec{k},\lambda}^\dagger a_{\vec{k},\lambda} \right) + a_{\vec{k},\lambda}^2 (-\omega_k^2) e^{-2i\omega_k t} + \left(a_{\vec{k},\lambda}^\dagger \right)^2 (-\omega_k^2) e^{2i\omega_k t} \right] \\ |\vec{k} \times \vec{A}_{\vec{k}}|^2 &= \sum_{\lambda} \frac{\hbar}{2kcV\epsilon_0} \left[k^2 \left(a_{\vec{k},\lambda} a_{\vec{k},\lambda}^\dagger + a_{\vec{k},\lambda}^\dagger a_{\vec{k},\lambda} \right) + a_{\vec{k},\lambda}^2 k^2 e^{-2i\omega_k t} + \left(a_{\vec{k},\lambda}^\dagger \right)^2 k^2 e^{2i\omega_k t} \right]. \end{aligned}$$

Now use $\omega_k^2 = c^2 k^2$ and $[a_{\vec{k},\lambda}, a_{\vec{k}',\lambda'}^\dagger] = \delta_{\vec{k},\vec{k}'} \delta_{\lambda,\lambda'}$, we arrive

$$\frac{1}{c^2} |\dot{\vec{A}}_{\vec{k}}(t)|^2 + |\vec{k} \times \vec{A}_{\vec{k}}(t)|^2 = \frac{2\hbar}{cV\epsilon_0} \sum_{\lambda} k \left(a_{\vec{k},\lambda}^\dagger a_{\vec{k},\lambda} + \frac{1}{2} \right),$$

and finally

$$H_{\text{rad}} = \hbar c \sum_{\vec{k},\lambda} k \left(a_{\vec{k},\lambda}^\dagger a_{\vec{k},\lambda} + \frac{1}{2} \right)$$