Karlsruher Institut für Technologie

Institut für Theorie
der Kondensierten Materie

Moderne Theoretische Physik II (WS 2024/25)

Prof. Dr. A. Shnirman
Adrian Reich

Lösungen zu Blatt 3
Besprechung 12.11.2024

Crashkurs: Quantisierung des elektromagnetischen Feldes

Um Prozesse zu beschreiben, bei denen Photonen absorbiert oder emittiert werden, können wir diese als quantisierte Anregungen des elektromagnetischen Feldes verstehen. Wir bedienen uns dabei einer Analogie mit dem harmonischen Oszillator und führen Leiteroperatoren $a^{(\dagger)}_{\boldsymbol{k},\lambda}$ ein, die, angewandt auf einen Zustand, Photonen mit Wellenvektor $\boldsymbol{k}$ und Polarisation λ vernichten (erzeugen). Der zugehörige Hamiltonoperator lautet

$$H_{\text{e.m.}} = \sum_{\boldsymbol{k}} \sum_{\lambda=1,2} \hbar\omega_{\boldsymbol{k}} \left(a^\dagger_{\boldsymbol{k},\lambda} a_{\boldsymbol{k},\lambda} + \frac{1}{2} \right), \qquad \omega_{\boldsymbol{k}} = c|\boldsymbol{k}|, \tag{1}$$

und die Leiteroperatoren erfüllen die Kommutatorrelationen

$$[a_{\boldsymbol{k},\lambda}, a^\dagger_{\boldsymbol{k}',\lambda'}] = \delta_{\boldsymbol{k},\boldsymbol{k}'}\delta_{\lambda,\lambda'}, \quad [a_{\boldsymbol{k},\lambda}, a_{\boldsymbol{k}',\lambda'}] = [a^\dagger_{\boldsymbol{k},\lambda}, a^\dagger_{\boldsymbol{k}',\lambda'}] = 0. \tag{2}$$

Es gilt damit

$$a_{\boldsymbol{k},\lambda} |n_{\boldsymbol{k},\lambda}\rangle = \sqrt{n_{\boldsymbol{k},\lambda}}\, |n_{\boldsymbol{k},\lambda} - 1\rangle, \quad a^\dagger_{\boldsymbol{k},\lambda} |n_{\boldsymbol{k},\lambda}\rangle = \sqrt{n_{\boldsymbol{k},\lambda} + 1}\, |n_{\boldsymbol{k},\lambda} + 1\rangle . \tag{3}$$

$|n_{\boldsymbol{k},\lambda}\rangle$ bezeichnet dabei einen Zustand mit $n_{\boldsymbol{k},\lambda}$ Photonen mit Wellenvektor $\boldsymbol{k}$ und Polarisation λ, also $a^\dagger_{\boldsymbol{k},\lambda} a_{\boldsymbol{k},\lambda} |n_{\boldsymbol{k},\lambda}\rangle = n_{\boldsymbol{k},\lambda} |n_{\boldsymbol{k},\lambda}\rangle$.

1. Spontane Emission – Dipolübergang im Wasserstoffatom (12 Punkte)

Der Hamiltonoperator für ein Elektron im Wasserstoffatom, das einem elektromagnetischen Feld $(\phi(\boldsymbol{r},t), \boldsymbol{A}(\boldsymbol{r},t))$ ausgesetzt ist, hat die Form

$$H_{\text{Atom}} = \frac{1}{2m} \left(\boldsymbol{p} + e\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r},t)\right)^2 - e\phi(\boldsymbol{r},t) + V(r), \tag{4}$$

mit $V(r) = -e^2/(4\pi\varepsilon_0 r)$ (in SI Einheiten). Wir wählen im Folgenden die Coulomb-Eichung und nehmen an, dass der Raum außerhalb des Atoms ladungsfrei ist

$$\boldsymbol{\nabla} \cdot \boldsymbol{A}(\boldsymbol{r},t) = 0, \quad \phi(\boldsymbol{r},t) = 0. \tag{5}$$

Zudem beschränken wir uns auf die lineare Kopplung mit dem Vektorpotential $\boldsymbol{A}$, den sogenannten paramagnetischen Term, und vernachlässigen den $\boldsymbol{A}^2$-Beitrag (diamagnetischer Term). Der Hamiltonoperator lautet damit

$$H_{\text{Atom}} = H_0 + H_{\text{Koppl.}}, \qquad H_0 = \frac{\boldsymbol{p}^2}{2m} + V(r), \quad H_{\text{Koppl.}} = \frac{e}{m}\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{p}. \tag{6}$$

a) Zeigen Sie

$$\boldsymbol{p} = \frac{im}{\hbar}[H_0, \boldsymbol{r}]. \qquad \text{(1 Punkt)} \tag{7}$$

Ziel dieser Aufgabe ist es, die durschnittliche Lebensdauer eines Elektrons im angeregten Zustand mit $n = 2$, $l = 1$ und $m = 0$ zu berechnen. Unter Emission eines Photons kann dieses nämlich spontan in den Grundzustand übergehen. Das Vektorpotential (in einem System mit Volumen V) kann dabei wie folgt durch die Photon-Erzeuger und -Vernichter ausgedrückt werden (die Herleitung hierfür lernen Sie im nächsten Semester kennen)

$$\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r}) = \sum_{\boldsymbol{k}} \sum_{\lambda=1,2} \sqrt{\frac{\hbar}{2\varepsilon_0 \omega_{\boldsymbol{k}} V}} \left(\hat{\boldsymbol{e}}_{\boldsymbol{k},\lambda} a_{\boldsymbol{k},\lambda} e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}} + \hat{\boldsymbol{e}}^*_{\boldsymbol{k},\lambda} a^\dagger_{\boldsymbol{k},\lambda} e^{-i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}} \right). \tag{8}$$

Dabei gilt für die Polarisationsvektoren

$$\hat{\boldsymbol{e}}^*_{\boldsymbol{k},\lambda} \cdot \hat{\boldsymbol{e}}_{\boldsymbol{k},\lambda} = 1, \quad \hat{\boldsymbol{e}}^*_{\boldsymbol{k},1} \cdot \hat{\boldsymbol{e}}_{\boldsymbol{k},2} = \boldsymbol{k} \cdot \hat{\boldsymbol{e}}_{\boldsymbol{k},1} = \boldsymbol{k} \cdot \hat{\boldsymbol{e}}_{\boldsymbol{k},2} = 0. \tag{9}$$

Am einfachsten ist es hier die lineare Polarisation zu wählen, in der $\hat{\boldsymbol{e}}_{\boldsymbol{k},\lambda}$ reell sind. Der Zustand des gesamten Systems $|\psi\rangle$ ist gegeben durch den Zustand des Elektrons $|n, l, m\rangle$ gemeinsam mit dem Anregungszustand des elektromagnetischen Feldes $|n_{\boldsymbol{k},\lambda}\rangle$,

$$|\psi\rangle = |n, l, m\rangle \otimes |n_{\boldsymbol{k},\lambda}\rangle \,. \tag{10}$$

Die Übergangsrate vom betrachteten angeregten Zustand in den Grundzustand unter Emission eines Photons mit Polarisation λ und Wellenvektor $\boldsymbol{k}$

$$|2, 1, 0\rangle \otimes |\Omega\rangle \longrightarrow |1, 0, 0\rangle \otimes |1_{\boldsymbol{k},\lambda}\rangle \tag{11}$$

lautet damit mit Fermis Goldener Regel

$$\Gamma(\lambda, \boldsymbol{k}) = \frac{2\pi}{\hbar} \left| \left(\langle 1_{\boldsymbol{k},\lambda}| \otimes \langle 1, 0, 0| \right) H_{\text{Koppl.}} \left(|2, 1, 0\rangle \otimes |\Omega\rangle \right) \right|^2 \delta(\hbar\omega - \hbar\omega_k), \tag{12}$$

wobei $\omega \equiv (E_2 - E_1)/\hbar$ und $|\Omega\rangle$ den Zustand ohne Photonen beschreibt (Vakuum).

b) Zeigen Sie

$$\Gamma(\lambda, \boldsymbol{k}) = \frac{\pi e^2 \omega^2}{\varepsilon_0 \omega_k V} \left| \hat{\boldsymbol{e}}^*_{\boldsymbol{k},\lambda} \cdot \langle 1, 0, 0|\boldsymbol{r}|2, 1, 0\rangle \right|^2 \delta(\hbar\omega - \hbar\omega_k). \tag{13}$$

Nutzen Sie dabei die sogenannte Dipolnäherung

$$e^{-i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}} \approx 1. \tag{14}$$

Begründen Sie diese Näherung, indem Sie die relevante Energie- und Längenskala des Problems abschätzen. (5 Punkte)

Das verbleibende Matrixelement kann nun zu

$$\langle 1, 0, 0|\boldsymbol{r}|2, 1, 0\rangle \approx \frac{3a_0}{4} \hat{\boldsymbol{e}}_z \tag{15}$$

bestimmt werden.

c) Skizzieren Sie (grob) die Winkelverteilung der abgestrahlten Photonen. (1 Punkt)

d) Um die totale Rate zu erhalten, müssen wir über alle möglichen Endzustände des Photons summieren. Zeigen Sie

$$\sum_{\lambda=1,2} \int_0^\infty d\omega_k \, \nu(\omega_k) \int d\Omega_{\boldsymbol{k}} \, \Gamma(\lambda, \boldsymbol{k}) = \frac{e^2}{3\pi\varepsilon_0 \hbar c^3} \omega^3 \left| \langle 1, 0, 0|\boldsymbol{r}|2, 1, 0\rangle \right|^2 \equiv \Gamma_{\text{tot}}. \tag{16}$$

Die Zustandsdichte für Photonen (pro Polarisation) lautet dabei

$$\nu(\omega) = \frac{V}{8\pi^3 c^3} \omega^2 \tag{17}$$

und $\int d\Omega_{\boldsymbol{k}}$ bezeichnet die Integration über den Raumwinkel von $\boldsymbol{k}$. (4 Punkte)

e) Finden Sie den numerischen Wert für die durchschnittliche Lebensdauer $\tau = \Gamma_{\text{tot}}^{-1}$ des angeregten Zustands. (1 Punkt)

Lösungsvorschlag

a) Mit $[r_i, p_j] = i\hbar\delta_{ij}$, $[p_i, p_j] = [r_i, r_j] = 0$, finden wir

$$[H_0, r_i] = \frac{1}{2m}[p_j p_j, r_i] = \frac{1}{2m}(p_j[p_j, r_i] + [p_j, r_i]p_j) = -\frac{i\hbar}{m}p_i. \tag{18}$$

b) Wir berechnen zunächst

$$\langle 1_{\boldsymbol{k},\lambda}|\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r})|\Omega\rangle = \sum_{\boldsymbol{k}',\lambda'} \sqrt{\frac{\hbar}{2\varepsilon_0\omega_{k'}V}}\hat{\boldsymbol{e}}^*_{\boldsymbol{k}',\lambda'}e^{-i\boldsymbol{k}'\cdot\boldsymbol{r}}\underbrace{\langle 1_{\boldsymbol{k},\lambda}|a^\dagger_{\boldsymbol{k}',\lambda'}|\Omega\rangle}_{=\delta_{\boldsymbol{k},\boldsymbol{k}'}\delta_{\lambda,\lambda'}} = \sqrt{\frac{\hbar}{2\varepsilon_0\omega_k V}}\hat{\boldsymbol{e}}^*_{\boldsymbol{k},\lambda}e^{-i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}} \tag{19}$$

und finden damit

$$\Gamma(\lambda, \boldsymbol{k}) = \frac{2\pi}{\hbar}\frac{e^2}{m^2}\frac{\hbar}{2\varepsilon_0\omega_k V}\left|\hat{\boldsymbol{e}}^*_{\boldsymbol{k},\lambda}\cdot\langle 1,0,0|e^{-i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}\boldsymbol{p}|2,1,0\rangle\right|^2\delta(\hbar\omega - \hbar\omega_k). \tag{20}$$

Aufgrund der δ-Funktion, ist die Rate nur ungleich Null, wenn $\hbar\omega = \hbar\omega_k \Leftrightarrow k = 3R_y/(4\hbar c)$. Außerdem sind die Wellenfunktionen der stationären Zustände des Wasserstoffatoms lokalisiert auf einen Bereich der Größenordnung des bohrschen Radius a_0. Wir können damit abschätzen, dass im obigen Matrixelement nur Werte

$$\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r} \sim kr \sim 3a_0R_y/(4\hbar c) \approx 0{,}003 \ll 1 \tag{21}$$

relevant sind, womit wir nähern können $e^{-i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}} \approx 1$. Setzen wir nun für $\boldsymbol{p}$ das Ergebnis aus Aufgabenteil a) ein, folgt

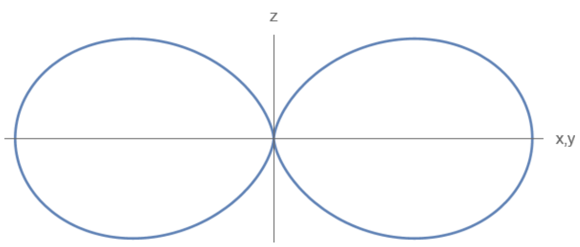
$$\Gamma(\lambda, \boldsymbol{k}) = \frac{\pi e^2}{\hbar^2\varepsilon_0\omega_k V}|\hat{\boldsymbol{e}}_{\boldsymbol{k},\lambda}\cdot\langle\underbrace{1,0,0|H_0}_{=E_1\langle 1,0,0|}\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}\underbrace{H_0|2,1,0\rangle}_{=E_2|2,1,0\rangle}|^2\delta(\hbar\omega - \hbar\omega_k) \tag{22}$$

$$= \frac{\pi e^2\omega^2}{\varepsilon_0\omega_k V}\left|\hat{\boldsymbol{e}}^*_{\boldsymbol{k},\lambda}\cdot\langle 1,0,0|\boldsymbol{r}|2,1,0\rangle\right|^2\delta(\hbar\omega - \hbar\omega_k). \tag{23}$$

c) Die Winkelverteilung ist durch das Skalarprodukt zwischen Polarisationsvektoren und dem Matrixelement$\propto \hat{\boldsymbol{e}}_z$ bestimmt. Die Propagationsrichtung $\hat{\boldsymbol{k}}$ des Photons ist dabei senkrecht zu beiden Polarisationsvektoren. Wir können die Richtung $\hat{\boldsymbol{e}}_z$ in dem Koordinatensystem, das durch die beiden Polarisationsvektoren und die Richtung $\hat{\boldsymbol{k}}$ aufgespannt wird, durch Kugelkoordinaten charakterisieren, sodass gilt

$$|\hat{\boldsymbol{e}}^*_{\boldsymbol{k},1}\cdot\hat{\boldsymbol{e}}_z|^2 + |\hat{\boldsymbol{e}}^*_{\boldsymbol{k},2}\cdot\hat{\boldsymbol{e}}_z|^2 = \sin^2\theta_k\cos^2\phi_k + \sin^2\theta_k\sin^2\phi_k = \sin^2\theta_k. \tag{24}$$

Die Abstrahlung ist damit rotationssymmetrisch um die z-Achse und es werden keine Photonen in z-Richtung abgestrahlt. Am wahrscheinlichsten ist eine Emission senkrecht zur z-Achse. Wir erhalten also die übliche Dipolstrahlung. Trägt man die Wahrscheinlichkeit als Abstand zum Ursprung in der entsprechenden Richtung auf, erhält man ein Bild wie folgt:



d) Die Integration über ω_k ist mithilfe der δ-Funktion einfach ausgeführt. Nennen wir $\langle 1,0,0|\boldsymbol{r}|2,1,0\rangle \equiv \boldsymbol{d} \propto \hat{\boldsymbol{e}}_z$ bleibt

$$\Gamma_{\text{tot}} = \frac{e^2\omega^3}{8\pi^2\varepsilon_0\hbar c^3}|\boldsymbol{d}|^2 \int d\Omega_{\boldsymbol{k}} \left(|\hat{\boldsymbol{e}}^*_{\boldsymbol{k},1}\cdot\hat{\boldsymbol{e}}_z|^2 + |\hat{\boldsymbol{e}}^*_{\boldsymbol{k},2}\cdot\hat{\boldsymbol{e}}_z|^2\right). \tag{25}$$

Mit der Transformation in Kugelkoordinaten wie in Aufgabenteil c) folgt

$$\Gamma_{\text{tot}} = \frac{e^2\omega^3}{8\pi^2\varepsilon_0\hbar c^3}|\boldsymbol{d}|^2\, 2\pi \int_{-1}^{1} d\cos\theta_k (1-\cos^2\theta_k) = \frac{e^2\omega^3}{3\pi\varepsilon_0\hbar c^3}|\boldsymbol{d}|^2. \tag{26}$$

e) Setzen wir alle Zahlenwerte für die physikalischen Konstanten ein, finden wir für die Lebensdauer des angeregten Zustands

$$\tau = \Gamma_{\text{tot}}^{-1} \approx 1{,}57\cdot 10^{-9}\,\text{s}. \tag{27}$$

Dies ist übrigens tatsächlich eine gute Näherung an experimentell bestimmte Werte, wie bspw. in folgender Publikation:

PHYSICAL REVIEW VOLUME 175, NUMBER 1 5 NOVEMBER 1968

Radiative Mean-Life Measurements of Some Atomic-Hydrogen Excited States Using Beam-Foil Excitation*

E. L. Chupp, L. W. Dotchin, and D. J. Pegg
Physics Department, University of New Hampshire, Durham, New Hampshire
(Received 8 August 1968)

The beam-foil excitation method has been used to measure the radiative mean lives of the $2p$ and $3p$ states of atomic hydrogen. The results obtained were $(1.60\pm0.01)\times10^{-9}$ sec and $(5.5\pm0.2)\times10^{-9}$ sec, respectively. A study of the results of this experiment has led to the following conclusions: (a) the Lyman-α decay curves are best fitted by the sum of two ex-

2. Zeitabhängige Störungstheorie zweiter Ordnung (8 Punkte)

Wir betrachten noch einmal den harmonischen Oszillator mit einer zeitabhängigen Störung aus Blatt 1, Aufgabe 3. Die Störung $V(t)$ war gegeben durch

$$V(t) = \sqrt{2\hbar m\omega^3}\,\lambda x \cdot \begin{cases} t/T, & 0 < t < T/2 \\ (1-t/T), & T/2 < t < T, \\ 0, & t < 0 \text{ oder } t > T, \end{cases} \tag{28}$$

wobei $\lambda \ll 1$. Zum Zeitpunkt $t=0$ befinde sich das System wieder im Grundzustand.

Anders als auf Blatt 1, wollen wir nun die Wahrscheinlichkeit berechnen, dass sich das System nach der Zeit $t > T$ im **zweiten** angeregten Zustand befindet. Hierbei ist die Störungstheorie erster Ordnung nicht ausreichend und wir müssen in die zweite Ordnung gehen, um ein von Null verschiedenes Ergebnis zu erhalten.

Nutzen Sie die Reihenentwicklung des Zeitentwicklungsoperators im Wechselwirkungsbild (Dyson-Reihe) bis zur zweiten Ordnung in λ und finden Sie damit die gesuchte Übergangswahrscheinlichkeit $P_{0\to2}(T)$.

Lösungsvorschlag

Der Zustand im Wechselwirkungsbild zum Zeitpunkt t ist gegeben durch

$$|\psi_I(t)\rangle = U_I(t,0)\,|0\rangle\,, \tag{29}$$

wobei der Zeitentwicklungsoperator durch die Dyson-Reihe ausgedrückt werden kann (mit Zeitordnungoperator $\mathcal{T}$)

$$
\begin{aligned}
U_I(t,0) &= \mathcal{T}\exp\left(-\frac{i}{\hbar}\int_0^t dt'\, V_I(t')\right) && (30)\\
&= 1-\frac{i}{\hbar}\int_0^t dt'\, V_I(t') - \frac{1}{\hbar^2}\int_0^t dt' \int_0^{t'} dt''\, V_I(t')V_I(t'') + \mathcal{O}(\lambda^3). && (31)
\end{aligned}
$$

Die gesuchte Übergangswahrscheinlichkeit ist dann gegeben durch $P_{0\to 2} = |\langle 2|\psi_I(t)\rangle|^2$. In Gl. (29) müssen also mindestens zwei Aufsteigeoperatoren auf $|0\rangle$ wirken, damit das Skalarprodukt nicht Null ist. Da unsere Störung aber linear in den Leiteroperatoren ist $V \sim x \sim a + a^\dagger$, kann es erst ab der zweiten Ordnung in λ einen Beitrag geben. Es folgt also

$$
\begin{aligned}
\langle 2|\psi_I(t)\rangle &= -\frac{2\hbar m\omega^3\lambda^2}{\hbar^2}\int_0^t dt'\, \tilde{V}(t') \int_0^{t'} dt''\, \tilde{V}(t'')\, \langle 2|e^{iH_0t'/\hbar} x e^{-iH_0t'/\hbar} e^{iH_0t''/\hbar} x e^{-iH_0t''/\hbar}|0\rangle \\
&= -\sqrt{2}\omega^2\lambda^2 \int_0^t dt'\, \tilde{V}(t') e^{i(E_2-E_1)t'/\hbar} \int_0^{t'} dt''\, \tilde{V}(t'') e^{i(E_1-E_0)t''/\hbar} && (32)
\end{aligned}
$$

wobei $\tilde{V} \equiv V/(\sqrt{2\hbar m\omega^3}\,\lambda x)$. Es ist $E_2 - E_1 = E_1 - E_0 = \hbar\omega$, womit folgt

$$
\begin{aligned}
\langle 2|\psi_I(t)\rangle = -\sqrt{2}\omega^2\lambda^2 \Bigg[& \int_0^{T/2} dt'\, \frac{t'}{T} e^{i\omega t'} \int_0^{t'} dt''\, \frac{t''}{T} e^{i\omega t''} + \\
& + \int_{T/2}^{T} dt' \left(1-\frac{t'}{T}\right) e^{i\omega t'} \int_0^{T/2} dt''\, \frac{t''}{T} e^{i\omega t''} + && (33)\\
& + \int_{T/2}^{T} dt' \left(1-\frac{t'}{T}\right) e^{i\omega t'} \int_{T/2}^{t'} dt'' \left(1-\frac{t''}{T}\right) e^{i\omega t''} \Bigg] \\
= -\frac{\lambda^2}{\sqrt{2}} & \frac{\left(e^{i\omega T/2}-1\right)^4}{\omega^2 T^2}. && (34)
\end{aligned}
$$

Die Übergangswahrscheinlichkeit lautet also

$$
P_{0\to 2} = 128\lambda^4 \frac{\sin^8(\omega T/4)}{\omega^4 T^4}. \qquad (35)
$$