Spontane Emission, Dipolübergänge

3.7. Spontane Emission

Wir betrachten ein Elektron in einem Atom, das durch spontane Emission eines Photons mit Wellenvektor $\vec{k}$ und Polarisation λ vom Zustand $|m\rangle$ in den Zustand $|n\rangle$ übergeht.

$$|0\rangle|m\rangle \longrightarrow a^{\dagger}_{\vec{k},\lambda}|0\rangle|n\rangle$$

Nach obiger Fourierzerlegung von $A(\vec{r},t)$ ist $V(t)$ von der Form

$$V(t) = \theta(t)\left(F e^{-i\omega_k t} + F^{\dagger} e^{i\omega_k t}\right)$$

mit

$$V(t) = -\frac{e}{c}\,\theta(t)\int d^3r\; \vec{j}(\vec{r})\cdot\vec{A}(\vec{r},t)$$

($\phi(\vec{r},t) = 0$, Term $\sim \vec{A}^2$ trägt nicht bei zu 1-Photon Emission) wegen $a_{\vec{k},\lambda}|0\rangle = 0$ trägt der

Term $\sim F$ in $V(t)$ nicht bei.

Dann gilt (siehe Kapitel 3.5 "Periodische Störung")

$$\Gamma_{m\to n;k,\lambda} = \frac{2\pi}{\hbar}\,\delta(E_m - E_n - \hbar\omega_k)\,|\langle n,0|a_{\vec{k},\lambda}F^{+}|0,m\rangle|^2$$

mit

$$A(\vec{r},t) = \sum_{\vec{k},\lambda}\sqrt{\frac{2\pi\hbar c}{|\vec{k}|\cdot V}}\Big(a_{\vec{k},\lambda}\,\vec{\varepsilon}_\lambda(\vec{k})\,e^{i(\vec{k}\vec{r}-\omega_k\cdot t)}$$

$$+\,a^{+}_{\vec{k},\lambda}\,\vec{\varepsilon}^{\,*}_\lambda(\vec{k})\,e^{-i(\vec{k}\vec{r}-\omega_k\cdot t)}\Big)$$

gilt

$$F^{+} = -\frac{e}{c}\int d^3r\,\vec{j}(\vec{r})\cdot\sum_{\vec{k}',\lambda'}\sqrt{\frac{2\pi\hbar c}{k'\cdot V}}\,a^{+}_{\vec{k}',\lambda'}\,\vec{\varepsilon}^{\,*}_{\lambda'}(\vec{k}')\,e^{-i\vec{k}'\vec{r}}$$

wobei $k = |\vec{k}|$

$$\Rightarrow \Gamma_{m\to n;\,k,\lambda} = \frac{(2\pi)^2 e^2}{c}\,\delta(E_m - E_n - \hbar\omega_k)$$

$$\left|\langle n,0|\int d^3r\,\vec{j}(\vec{r})\sum_{\vec{k}',\lambda'}\frac{1}{\sqrt{k'V}}\,a_{\vec{k},\lambda}\,a^\dagger_{\vec{k}',\lambda'}\,\vec{\varepsilon}^{\,*}_{\lambda'}(\vec{k}')\right.$$

$$\left.\cdot\, e^{-i\vec{k}'\cdot\vec{r}}|0,m\rangle\right|^2$$

Wegen $a_{\vec{k},\lambda}|0,m\rangle = 0$ kann

$a_{\vec{k},\lambda}\,a^\dagger_{\vec{k}',\lambda'}$ im obigen Ausdruck ersetzt

werden durch $[a_{\vec{k},\lambda}, a^\dagger_{\vec{k}',\lambda'}]$.

Mit $[a_{\vec{k},\lambda}, a^\dagger_{\vec{k}',\lambda'}] = \delta_{\vec{k}\vec{k}'}\,\delta_{\lambda\lambda'}$ folgt

$$\boxed{\Gamma_{m\to n;\,k,\lambda} = \frac{(2\pi)^2 e^2}{ck}\,\delta(E_m - E_n - \hbar\omega_k)\cdot \left|\langle n,0|\int d^3r\,\frac{1}{\sqrt{V}}\,\vec{j}(\vec{r})\cdot\vec{\varepsilon}^{\,*}_{\lambda}(\vec{k})\,e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}}|0,m\rangle\right|^2}$$

Die Energie $\hbar\omega_k$ des abgestrahlten Photons ist festgelegt durch Energieerhaltung, die Richtung ist beliebig.

Wir betrachten die Leistung dP_λ, die in einen Raumwinkel $d\Omega$ im $\vec{k}$-Raum abgestrahlt wird. Es gilt

$$dP_\lambda = \sum_{\vec{k}\in d\Omega} \underbrace{\hbar\omega_k}_{\text{Energie eines Photons mit Wellenzahl } \vec{k}} \overbrace{\Gamma_{m\to n,\vec{k},\lambda}}^{\text{Übergangsrate für ein Photon}}$$

In einer box mit Volumen V sind die Abstände der möglichen $|\vec{k}|$-Werte $\sim \frac{1}{L^3} \sim \frac{1}{V}$.

Für große V gehen wir von der Summe zum Integral über:

$$\sum_{\vec{k}} \to \int d^3k \, \frac{V}{(2\pi)^3}$$

In Kugelkoordinaten: $d^3k = k^2 dk\, d\Omega$

Wir verwenden außerdem die Fouriertransformierte der Stromdichte:

$$\vec{j}_{\vec{k}} = \int d^3r\, \vec{j}(\vec{r})\, e^{-i\vec{k}\vec{r}}$$

Dann

$$dP_\lambda = d\Omega \int \frac{k^2 dk}{(2\pi)^3} \hbar \underbrace{c\cdot k}_{\omega_k} \frac{(2\pi)^2 e^2}{c\cdot k} \delta(E_m - E_n - \hbar c k) \cdot$$

$$|\langle n,0|\, \vec{j}_{\vec{k}} \cdot \vec{\varepsilon}^{\,*}_{\vec{k},\lambda}\, |0,m\rangle|^2$$

$$= d\Omega\, (2\pi)^2 e^2 \int \frac{dk}{(2\pi)^3}\, k^2 \frac{\hbar}{\hbar c}\, \delta\!\left(k - \frac{(E_m - E_n)}{\hbar c}\right)$$

$$\cdot |\langle n,0|\, \vec{j}_{\vec{k}} \cdot \vec{\varepsilon}^{\,*}_{\vec{k},\lambda}\, |0,m\rangle|^2$$

mit $\omega =: \frac{E_m - E_n}{\hbar}$ gilt dann

$$\boxed{\frac{dP_\lambda}{d\Omega} = \frac{\omega^2 e^2}{2\pi c^3} \cdot |\langle n,0|\, \vec{j}_{\vec{k}} \cdot \vec{\varepsilon}^{\,*}_{\vec{k},\lambda}\, |0,m\rangle|^2}$$

Für Atome gilt

$$\vec{k}\cdot\vec{r} \approx k\cdot a_0 = \frac{\omega}{c}\cdot a_0 = \frac{\Delta E}{\hbar c}\cdot a_0$$

Bohr-Radius

Die Energieunterschiede in einem Atom liegen typischerweise im Bereich $\Delta E \approx mc^2\alpha^2$.

Dann gilt

$$\vec{k}\cdot\vec{r} \approx \frac{mc^2\alpha^2}{\hbar c}\cdot a_0 = \frac{mc^2\alpha^2}{\hbar c}\cdot\frac{\hbar}{mc\alpha} = \alpha \ll 1$$

Damit kann man $e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}}$ in $\vec{k}\cdot\vec{r}$ entwickeln, also

$$\langle n,0|\vec{j}_{\vec{k}}|0,m\rangle = \int d^3r\, \langle n,0|e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}}\,\vec{j}(\vec{r})\,|0,m\rangle$$

$$\approx \langle n,0|\vec{j}_0|0,m\rangle - i\int d^3r\,\langle n,0|(\vec{k}\cdot\vec{r})\,\vec{j}(\vec{r})\,|0,m\rangle$$

$$-\frac{1}{2}\int d^3r\,\langle n,0|(\vec{k}\cdot\vec{r})^2\,\vec{j}(\vec{r})|0,m\rangle + \ldots \qquad (*)$$

$$\vec{j}_0 = \frac{1}{2}\int d^3r \sum_i \left\{ \frac{\vec{p}_i}{m}, \delta(\vec{r}-\vec{r}_i) \right\} = \frac{1}{m}\sum_i \vec{p}_i =: \frac{\vec{P}}{m}$$

Obige Terme entsprechen (in dieser Reihenfolge) elektrischen Dipolübergängen, magnetischen Dipolübergängen, elektrischen Quadrupolübergängen.