Quantenmechanik II
FSU Jena - WS 2009/2010
Übungsserie 12 - Lösungen

Stilianos Louca

24. Januar 2010

Aufgabe 21

Erinnerung

Der Eigenzustand $|n,l,m_l,m_s\rangle = |n,l,m_l\rangle \otimes |m_s\rangle$ ist gegeben durch

$$|n,l,m_l\rangle(r,\vartheta,\varphi) = \underbrace{\sqrt{\left(\frac{2}{na_0}\right)^3 \frac{(n-l-1)!}{2n(n+l)!}}}_{N_{n,l}} \cdot e^{-\frac{r}{na_0}} \left(\frac{2r}{na_0}\right)^l \cdot L_{n-l-1}^{2l+1}\left(\frac{2r}{na_0}\right) \cdot Y_l^m(\vartheta,\varphi)$$

wobei

$$L_n^a(x) := \frac{x^{-a}e^x}{n!}\frac{d^n}{dx^n}\left(e^{-x}x^{n+a}\right)$$

die zugeordneten Laguerre-Polynome,

$$Y_l^m(\vartheta,\varphi) = \underbrace{\sqrt{\frac{(2l+1)}{4\pi}\frac{(l-m)!}{(l+m)!}}}_{M_{l,m}} \cdot P_l^m(\cos\vartheta)\cdot e^{im\varphi}$$

die Kugelflächenfunktionen,

$$P_l^m(x) := \frac{(-1)^m}{2^l l!}(1-x^2)^{\frac{m}{2}}\frac{d^{l+m}}{dx^{l+m}}\left(x^2-1\right)^l$$

die zugeordneten Legendre Polynome und $N_{n,l}$ Normierungskonstanten sind. Im Kontext der zeitabhängigen Störungsrechnung 1. Ordnung & Dipolnäherung sind

$$A_{ae} = \frac{|\mathbf{d}_{ea}|^2\,\omega_{ae}^3}{3\varepsilon_0\pi c^3\hbar}$$

und

$$B_{ae} = \frac{\pi\,|\mathbf{d}_{ae}|^2}{3\hbar^2\varepsilon_0}$$

jeweils die Einsteinschen Übergangskoeffizienten der spontanen & stimulierten Emission (bzw. Absorption) bei Übergang zwischen zweier atomarer Zustände

$$|a\rangle := |n,l,m_l,m_s\rangle \to |e\rangle := \left|\widetilde{n},\widetilde{l},\widetilde{m}_l,\widetilde{m}_s\right\rangle$$

wobei

$$\mathbf{d}_{ae} := e\cdot\langle e|\,\hat{\mathbf{X}}\,|a\rangle = e\cdot\langle\widetilde{m}_s\,|m_s\rangle\cdot\left\langle\widetilde{n},\widetilde{l},\widetilde{m}_l\middle|\hat{\mathbf{X}}\middle|n,l,m_l\right\rangle$$

Notwendige Bedingungen für Übergang

Notwendig für eine nicht-verschwindende Übergangswahrscheinlichkeit, ist das nicht verschwinden des Koeffizienten $\mathbf{d}_{ae}$, also insbesondere $\langle \widetilde{m}_s \, | m_s \rangle \neq 0$, sprich

$$\boxed{\Delta m_s = 0} \tag{0.1}$$

Mit

$$\left\langle \widetilde{n}, \widetilde{l}, \widetilde{m}_l \middle| \hat{\mathbf{X}} \middle| n, l, m_l \right\rangle \sim \int_0^\infty e^{-\frac{r}{a_0}\left(\frac{1}{n}+\frac{1}{\widetilde{n}}\right)} r^{\widetilde{l}+l} \cdot L_{\widetilde{n}-\widetilde{l}-1}^{2\widetilde{l}+1}\left(\frac{2r}{\widetilde{n}a_0}\right) \cdot L_{n-l-1}^{2l+1}\left(\frac{2r}{na_0}\right) \; r^2 \; dr \tag{0.2}$$

$$\tag{0.3}$$

$$\cdot \int_{S^2} Y_{\widetilde{l}}^{\widetilde{m}_l *} \cdot Y_l^{m_l} \cdot \begin{pmatrix} \sin\vartheta\cos\varphi \\ \sin\vartheta\sin\varphi \\ \cos\vartheta \end{pmatrix} \; d\Omega \tag{0.4}$$

muss auch gelten[1]

$$0 \overset{!}{\neq} \int_{S^2} Y_{\widetilde{l}}^{\widetilde{m}_l *} \cdot Y_l^{m_l} \cdot \begin{pmatrix} \sin\vartheta\cos\varphi \\ \sin\vartheta\sin\varphi \\ \cos\vartheta \end{pmatrix} \; d\Omega$$

$$\sim \int_0^\pi P_{\widetilde{l}}^{\widetilde{m}_l}(\cos\vartheta) P_l^{m_l}(\cos\vartheta)\sin\vartheta \begin{pmatrix} \sin\vartheta \\ \sin\vartheta \\ \cos\vartheta \end{pmatrix} \odot \int_0^{2\pi} e^{i(\widetilde{m}_l - m_l)\varphi} \begin{pmatrix} \cos\varphi \\ \sin\varphi \\ 1 \end{pmatrix} \; d\varphi \tag{0.5}$$

und insbesondere

$$0 \neq \int_0^{2\pi} e^{i(\widetilde{m}_l - m_l)\varphi} \begin{pmatrix} \cos\varphi \\ \sin\varphi \\ 1 \end{pmatrix} \; d\varphi = \begin{pmatrix} \pi \cdot \delta_{1,|\Delta m_l|} \\ \\ i\pi \cdot (\delta_{1,\Delta m_l} - \delta_{-1,\Delta m_l}) \\ \\ 2\pi \cdot \delta_{0,\Delta m_l} \end{pmatrix} \tag{0.6}$$

sprich

$$\boxed{\Delta m_l \in \{0, \pm 1\}} \tag{0.7}$$

Mit

$$\left[\hat{\mathbf{L}}^2, \left[\hat{\mathbf{L}}^2, \hat{\mathbf{X}}\right]\right] = 2\hbar^2 \left[\hat{\mathbf{X}}\hat{\mathbf{L}}^2 + \hat{\mathbf{L}}^2\hat{\mathbf{X}}\right] \tag{0.8}$$

ergibt sich ferner

$$2\hbar^4 \left[\widetilde{l}(\widetilde{l}+1) + l(l+1)\right] \cdot \langle e| \, \hat{\mathbf{X}} \, |a\rangle = \langle e| \, 2\hbar^2 \left[\hat{\mathbf{X}}\hat{\mathbf{L}}^2 + \hat{\mathbf{L}}^2\hat{\mathbf{X}}\right] |a\rangle \overset{(0.8)}{=} \langle e| \left[\hat{\mathbf{L}}^2, \left[\hat{\mathbf{L}}^2, \hat{\mathbf{X}}\right]\right] |a\rangle$$

$$\overset{\text{analog}}{=} \hbar^4 \cdot \left[\widetilde{l}(\widetilde{l}+1) - l(l+1)\right]^2 \cdot \langle e| \, \hat{\mathbf{X}} \, |a\rangle$$

Bei nicht-verschwindender Übergangswahrscheinlichkeit[2] also

$$2\left[\widetilde{l}(\widetilde{l}+1) + l(l+1)\right] = \left[\widetilde{l}(\widetilde{l}+1) - l(l+1)\right]^2 \tag{0.9}$$

Lösung obiger quadratischer Gleichung in $\widetilde{l}(\widetilde{l}+1)$ ergibt

$$\widetilde{l}(\widetilde{l}+1) = l(l+1) + 1 \pm (2l+1) \tag{0.10}$$

Nun lässt sich zwischen folgenden Fällen unterscheiden:

[1] Konvention: Für zwei Vektoren $\mathbf{a}, \mathbf{b} \in \mathbb{C}^n$ setze $\mathbf{a} \odot \mathbf{b} := (a^1 b^1, .., a^n, b^n)$.

[2] Also mindestens eine Komponente von $\langle e| \, \hat{\mathbf{X}} \, |a\rangle$ nicht Null.

Fall: $\widetilde{l}(\widetilde{l}+1) = l^2 + 3l + 2 = (l+1)(l+2)$. Setzt man $\lambda := l+1$ so muss gelten

$$\widetilde{l} \cdot (\widetilde{l}+1) = \lambda \cdot (\lambda+1) \quad , \quad \widetilde{l} \in \mathbb{N}_0,\ \lambda \in \mathbb{N}$$

Doch dies impliziert $\widetilde{l} = \lambda$ bzw. $\widetilde{l} = l+1$. (vgl. Abb. (0.1)).

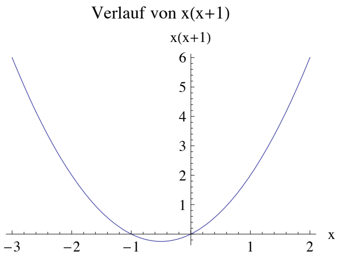

Abbildung 0.1: Verlauf der Parabel $y = x(x+1)$.

Fall: $\widetilde{l}(\widetilde{l}+1) = l^2 - l = l(l-1)$. Setzt man $\lambda := l-1$ so muss gelten

$$\widetilde{l} \cdot (\widetilde{l}+1) = \lambda \cdot (\lambda+1) \quad , \quad \widetilde{l} \in \mathbb{N}_0,\ \lambda \in \mathbb{N}_0 \cup \{-1\}$$

Doch dies impliziert analog zu oben $\widetilde{l} = \lambda$ oder $\widetilde{l} = 0,\ \lambda = -1$.
Doch im zweiten Fall wären $l = \widetilde{l} = m_l = \widetilde{m}_l = 0$ und nach Bedingung (0.5) bzw. (0.6)

$$0 \neq \int_0^\pi \underbrace{P_0^0(\cos\vartheta) P_0^0(\cos\vartheta)}_{1} \sin\vartheta \cos\vartheta \ d\vartheta = 0$$

ein Widerspruch! Daher muss $\widetilde{l} = \lambda$ sein.

Auf alle Fälle also

$$\boxed{\Delta l = \pm 1} \tag{0.11}$$