

TILLEGG 15

15 Halvklassisk strålingsteori

I en kvantemekanisk teori for stråling vil en selvsagt helst ønske seg å behandle ikke bare partikler, men også det elektromagnetiske feltet kvantemekanisk. **Kvantiseringen av det elektromagnetiske feltet**, som trengs for å beskrive fotoner og prosesser der disse emitteres eller absorberes, må imidlertid vente til et senere kurs. Her må vi derfor nøye oss med en såkalt **halvklassisk strålingsteori**, der feltet behandles klassisk.

Vekselvirkningen mellom partiklene og strålingsfeltet svarer til visse **vekselvirkningsledd** i Hamilton-operatoren. Disse behandler vi som perturbasjoner, og vi studerer virkningen av dem ved hjelp av tidsavhengig perturbasjonsteori.

Framstillingen i dette Tillegget er nokså lik den du finner i kapittel 12 i Hemmers bok, men henvisninger gis også til relevante avsnitt i B&J og i Griffiths.

15.1 Ladet partikkel i ytre felt

(H 12.1, B&J 11.1)

15.1.a Schrödingerligningen

Anta at Hamilton-operatoren for én enkelt partikkel *uten* det elektromagnetiske feltet til stede er

$$\widehat{H}_0 = \frac{\widehat{\mathbf{p}}^2}{2m} + U(\mathbf{r}, t).$$

Her representerer potensialet $U(\mathbf{r}, t)$ mulige ikke-elektromagnetiske krefter. (Et eksempel er tyngdekraften.) Oppskriften for å finne Hamilton-operatoren \widehat{H} i *nærvær* av det elektromagnetiske feltet er da gitt ved substitusjonene

$$\widehat{H}_0 \rightarrow \widehat{H} - q\Phi(\mathbf{r}, t) \tag{T15.1}$$

$$\widehat{\mathbf{p}} \rightarrow \widehat{\mathbf{p}} - q\mathbf{A}(\mathbf{r}, t).$$

Denne oppskriften kalles **minimal kobling**. Her er q ladningen til partikkelen, og $\mathbf{A}(\mathbf{r}, t)$ og $\Phi(\mathbf{r}, t)$ er henholdsvis **vektorpotensialet** og **skalarpotensialet**, definert ved

$$\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A} \quad \text{og} \quad \mathcal{E} = -\nabla\Phi - \frac{\partial\mathbf{A}}{\partial t}.$$

Disse substitusjonene gir oss relasjonen

$$\widehat{H} - q\Phi = \frac{1}{2m}(\widehat{\mathbf{p}} - q\mathbf{A})^2 + U(\mathbf{r}, t).$$

Denne minimal-koblings-oppskriften er den samme som brukes i klassisk mekanikk. (Se f.eks Appendix A i Hemmer.) I fravær av ikke-elektromagnetiske krefter ($U(\mathbf{r}, t) = 0$) kommer vi da fram til følgende Schrödingerligning for en ladet partikkel i et elektromagnetisk felt:

$$\boxed{i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \left[\frac{1}{2m}(\widehat{\mathbf{p}} - q\mathbf{A})^2 + q\Phi \right] \Psi,} \quad \left(\widehat{\mathbf{p}} \equiv \frac{\hbar}{i} \nabla \right). \quad (\text{T15.2})$$

15.1.b Justertransformasjoner av potensialene

Det er viktig å være klar over at en for gitte fysiske felter

$$\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A} \quad \text{og} \quad \mathcal{E} = -\nabla\Phi - \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t}$$

ikke kan fastlegge potensialene \mathbf{A} og Φ entydig. Et velkjent eksempel på dette har vi i elektrostatikken, hvor vi som kjent kan addere en vilkårlig konstant til Φ uten at \mathcal{E} endres. Valgfriheten når det gjelder potensialene er imidlertid mye større enn dette: Dersom $\mathbf{A}(\mathbf{r}, t)$ og $\Phi(\mathbf{r}, t)$ er et passende sett med potensialer, er det lett å se ved innsetting i ligningene ovenfor at vi like godt kan erstatte dem med et nytt sett av potensialer:

$$\mathbf{A}(\mathbf{r}, t) \rightarrow \mathbf{A}'(\mathbf{r}, t) = \mathbf{A}(\mathbf{r}, t) + \nabla \chi(\mathbf{r}, t). \quad (\text{T15.3})$$

$$\Phi(\mathbf{r}, t) \rightarrow \Phi'(\mathbf{r}, t) = \Phi(\mathbf{r}, t) - \frac{\partial \chi(\mathbf{r}, t)}{\partial t},$$

Her er $\chi(\mathbf{r}, t)$ en vilkårlig deriverbar funksjon. Denne såkalte **justertransformasjonen**¹ endrer ikke feltene, fordi

$$\nabla \times \mathbf{A}' = \nabla \times \mathbf{A} + \nabla \times \nabla \chi = \nabla \times \mathbf{A}$$

og

$$-\nabla \Phi' - \frac{\partial \mathbf{A}'}{\partial t} = -\nabla \Phi - \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} + \left(\nabla \frac{\partial}{\partial t} - \frac{\partial}{\partial t} \nabla \right) \chi = -\nabla \Phi - \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t}$$

for en vilkårlig funksjon $\chi(\mathbf{r}, t)$.

En står altså fritt til å justere potensialene ved hjelp av slike transformasjoner så mye en lyster. Denne friheten er generelt en fordel, fordi den tillater oss å velge den justeringen som passer oss best for hver enkelt problemstilling.

Her skal vi velge den såkalte **Coulomb-justeringen**, hvor vi ordner oss slik at vektorpotensialet er divergensfritt:

$$\boxed{\nabla \cdot \mathbf{A}(\mathbf{r}, t) = 0.} \quad (\text{Coulomb-justering}) \quad (\text{T15.4})$$

¹På engelsk er justertransformasjoner blitt hetende “gauge transformations”. Her uttales *gauge* på lignende måte som “cage” og “rage”.

Fra Maxwell-ligningen $\nabla \cdot \mathcal{E} = \rho/\epsilon_0$ følger det da at skalarpotensialet oppfyller Poissons ligning,

$$\nabla \cdot \left(\frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} - \nabla \Phi \right) = -\nabla^2 \Phi(\mathbf{r}, t) = \rho(\mathbf{r}, t)/\epsilon_0,$$

med løsningen

$$\Phi(\mathbf{r}, t) = \int \frac{\rho(\mathbf{r}', t) d^3 r'}{4\pi\epsilon_0 |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \quad \left(\begin{array}{c} \text{Instantant} \\ \text{Coulomb-potensial} \end{array} \right). \quad (\text{T15.5})$$

Her ser vi at skalarpotensialet Φ i punktet \mathbf{r} ved tiden t er bestemt av ladningsfordelingen $\rho(\mathbf{r}', t)$ ved samme tidspunkt t . Dette skalarpotensialet kalles derfor det *instantane* Coulomb-potensialet. En justering som oppfyller betingelsen $\nabla \cdot \mathbf{A} = 0$ kalles derfor en **Coulomb-justering**.

Det at Schrödingerligningen (T15.2) faktisk inneholder de juster-avhengige *potensialene* (istedenfor de fysiske feltene) kan kanskje virke skummelt — det betyr jo at løsningen $\Psi(\mathbf{r}, t)$ av (T15.2) vil avhenge av hvilken justering vi velger. Vi skal straks se at dette ikke er noe problem; det viser seg at bølgefunksjonen $\Psi(\mathbf{r}, t)$ avhenger av justeringen bare gjennom en fasefaktor. Derfor blir målbare størrelser som sannsynlighetstettheten og forventningsverdier av observable juster-*uavhengige*.

For å se hvordan dette henger sammen kan vi anta at Ψ' er en løsning av Schrödingerligningen med de transformerte potensialene \mathbf{A}' og Φ' ,

$$i\hbar \frac{\partial \Psi'}{\partial t} = \left[\frac{1}{2m} (\hat{\mathbf{p}} - q\mathbf{A}')^2 + q\Phi' \right] \Psi'. \quad (\text{T15.6})$$

Vi må nå finne sammenhengen mellom løsningen Ψ' av denne ligningen og løsningen Ψ for de opprinnelige potensialene, som oppfyller (T15.2),

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \left[\frac{1}{2m} (\hat{\mathbf{p}} - q\mathbf{A})^2 + q\Phi \right] \Psi.$$

Vi setter inn

$$\mathbf{A} = \mathbf{A}' - \nabla \chi \quad \text{og} \quad \Phi = \Phi' + \frac{\partial \chi}{\partial t}$$

i den sistnevnte ligningen, flytter leddet $q \frac{\partial \chi}{\partial t} \Psi$ over på venstresiden og multipliserer på begge sider med $\exp(iq\chi/\hbar)$. Dette gir

$$\begin{aligned} e^{iq\chi/\hbar} \left| i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} - q\Psi \frac{\partial \chi}{\partial t} = \left[\frac{1}{2m} \left(\frac{\hbar}{i} \nabla - q\mathbf{A}' + q\nabla\chi \right)^2 + q\Phi' \right] \Psi; \right. \\ \Downarrow \\ \left. i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \left[\Psi e^{iq\chi/\hbar} \right] = e^{iq\chi/\hbar} \left[\frac{1}{2m} \left(\frac{\hbar}{i} \nabla - q\mathbf{A}' + q\nabla\chi \right)^2 + q\Phi' \right] \Psi. \right. \end{aligned} \quad (\text{T15.7})$$

Ved hjelp av relasjonen

$$\frac{\hbar}{i} \nabla f(\mathbf{r}, t) e^{iq\chi/\hbar} = e^{iq\chi/\hbar} \left(\frac{\hbar}{i} \nabla + q\nabla\chi \right) f(\mathbf{r}, t),$$

som gjelder for en vilkårlig funksjon $f(\mathbf{r}, t)$, kan vi skrive ned følgende identitet:

$$e^{iq\chi/\hbar} \left(\frac{\hbar}{i} \nabla - q\mathbf{A}' + q\nabla\chi \right) f = \left(\frac{\hbar}{i} \nabla - q\mathbf{A}' \right) e^{iq\chi/\hbar} f.$$

Denne kan vi bruke to ganger til å flytte eksponensialfunksjonen på høyresiden i (T15.7) mot høyre. Resultatet er

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} [\Psi e^{iq\chi/\hbar}] = \left[\frac{1}{2m} \left(\frac{\hbar}{i} \nabla - q\mathbf{A}' \right)^2 + q\Phi' \right] \Psi e^{iq\chi/\hbar}. \quad (\text{T15.8})$$

Vi kan altså konkludere med at (T15.6), med de transformerte potensialene, oppfylles av

$$\Psi' = \Psi e^{iq\chi/\hbar},$$

der Ψ er løsningen av (T15.2), med de opprinnelige potensialene. Resultatet er altså akkurat som annonsert: De to bølgefunksjonene skiller seg fra hverandre bare med en fasefaktor.

Vi har jo tidligere lært at vi står fritt til å multiplisere bølgefunksjonen med en vilkårlig **global fasefaktor** (uavhengig av \mathbf{r} og t). Det vi har lært her kan oppsummeres på følgende måte: Vi står fritt til å multiplisere en løsning av (T15.2) med en vilkårlig **lokal fasefaktor** $\exp[iq\chi(\mathbf{r}, t)/\hbar]$ dersom vi kompenserer med tilsvarende justering av potensialene:²

$$\Psi(\mathbf{r}, t) \rightarrow \Psi'(\mathbf{r}, t) = \Psi(\mathbf{r}, t) \exp[iq\chi(\mathbf{r}, t)/\hbar],$$

$$\mathbf{A}(\mathbf{r}, t) \rightarrow \mathbf{A}'(\mathbf{r}, t) = \mathbf{A}(\mathbf{r}, t) + \nabla\chi(\mathbf{r}, t), \quad (\text{T15.9})$$

$$\Phi(\mathbf{r}, t) \rightarrow \Phi'(\mathbf{r}, t) = \Phi(\mathbf{r}, t) - \frac{\partial\chi(\mathbf{r}, t)}{\partial t}.$$

15.2 Feltet som perturbasjon

(H 12.2, B&J 11.1)

15.2.a Vekselvirkningsledd

Vi skal nå betrakte et system som består av en ladet partikkel sammen med et rent strålingsfelt. Vi har altså ingen "ytre" ladningsfordeling $\rho(\mathbf{r}, t)$. Derfor er $\Phi(\mathbf{r}, t)$ lik null i Coulomb-justering ($\nabla \cdot \mathbf{A} = 0$). Vi kan da skrive Hamilton-operatoren på formen

$$\widehat{H} = \frac{1}{2m} (\widehat{\mathbf{p}} - q\mathbf{A})^2 = \widehat{H}_0 + \widehat{H}'.$$

²Om vi ikke hadde noen potensialer fra før, ville altså en slik lokal justertransformasjon framtvinge potensialene $\mathbf{A}' = \nabla\Lambda$ og $\Phi' = -\partial\Lambda/\partial t$. Et **krav om lokal justerinvarians av bølgeligningen** (som vi kan kalle **justerprinsippet**) framtvinger altså på en måte de elektromagnetiske potensialene, som i denne sammenhengen kalles **justerpotensialene**. Om vi ikke kjente til det elektromagnetiske feltet og fotoner på forhånd, ville de kunne ha blitt oppdaget på denne måten.

Om noen synes dette virker søkt, så var det faktisk nettopp på denne måten de store gjennombruddene i partikkelfysikk kom i årene rundt 1970. Eksistensen til de tunge vektorbosonene W^\pm og Z_0 (oppdaget eksperimentelt i 1983) ble f.eks først forutsagt på basis av justerprinsippet for **elektrosvake vekselvirkninger**. Med et tilsvarende justerprinsipp i **kvantekromodynamikk** kunne en forutsi eksistensen til gluonet, som er den kraftbærende partikkelen i teorien for den sterke vekselvirkningen (mellom kvarker).

Her er $\widehat{H}_0 = \widehat{\mathbf{p}}^2/2m$ og

$$\begin{aligned}\widehat{H}' &= \widehat{H} - \widehat{H}_0 = \frac{1}{2m} [(\widehat{\mathbf{p}} - q\mathbf{A})^2 - \widehat{\mathbf{p}}^2] \\ &= -\frac{q}{2m}(\widehat{\mathbf{p}} \cdot \mathbf{A} + \mathbf{A} \cdot \widehat{\mathbf{p}}) + \frac{q^2 \mathbf{A}^2}{2m}.\end{aligned}$$

I Coulomb-justering kommuterer impulsoperatoren med vektorpotensialet; for en vilkårlig funksjon $f(\mathbf{r}, t)$ har vi at

$$\widehat{\mathbf{p}} \cdot \mathbf{A} f(\mathbf{r}, t) = \frac{\hbar}{i} \nabla \cdot (\mathbf{A} f) = \frac{\hbar}{i} (\nabla \cdot \mathbf{A}) f + \mathbf{A} \cdot \frac{\hbar}{i} \nabla f = \mathbf{A} \cdot \widehat{\mathbf{p}} f(\mathbf{r}, t). \quad (\text{T15.10})$$

Vekselvirkningen mellom partikkelen og strålingsfeltet representeres altså av vekselvirkningsleddene

$$\widehat{H}' = -\frac{q}{m} \mathbf{A} \cdot \widehat{\mathbf{p}} + \frac{q^2 \mathbf{A}^2}{2m} \equiv \widehat{H}'_1 + \widehat{H}'_2. \quad (\text{T15.11})$$

For et *system av partikler* (som f.eks et hydrogenatom), har vi tilsvarende

$$\widehat{H} = \widehat{H}_p + \widehat{H}', \quad (\text{T15.12})$$

hvor

$$\widehat{H}_p = \sum_i \frac{\widehat{\mathbf{p}}_i^2}{2m_i} + V_C(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots) \quad (\text{T15.13})$$

er Hamilton-operatoren i fravær av strålingsfeltet (men med Coulomb-vekselvirkningen mellom de ladete partiklene til stede), og hvor

$$\widehat{H}' = \sum_i \left\{ -\frac{q_i}{m_i} \mathbf{A}(\mathbf{r}_i, t) \cdot \widehat{\mathbf{p}}_i + \frac{q_i^2}{2m_i} [\mathbf{A}(\mathbf{r}_i, t)]^2 \right\} \quad (\text{T15.14})$$

representerer vekselvirkningen mellom de ladete partiklene og strålingsfeltet.

Nedenfor skal vi behandle \widehat{H}' som en perturbasjon, og bruke egenfunksjoner til \widehat{H}_p som begynnelses- og slutt-tilstander. Vi nøyer oss med å se på prosesser der det dominerende bidraget til overgangssannsynligheten kan beregnes ved hjelp av 1.-ordens perturbasjonsteori og kommer fra leddet

$$\widehat{H}' = -\frac{q}{m} \mathbf{A} \cdot \widehat{\mathbf{p}}, \quad (\text{T15.15})$$

dvs prosesser der \mathbf{A}^2 -leddet gir neglisjerbare bidrag til overgangssannsynligheten.

15.2.b Strålingsfeltet

I fravær av ytre ladninger, og med Coulomb-justering ($\nabla \cdot \mathbf{A} = 0$), følger det som nevnt fra (T15.5) at skalarpotensialet $\Phi(\mathbf{r}, t)$ er lik null. De fysiske feltene

$$\boldsymbol{\mathcal{E}} = -\frac{\partial \mathbf{A}(\mathbf{r}, t)}{\partial t} \quad \text{og} \quad \mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A}(\mathbf{r}, t)$$

kan da begge avledes fra vektorpotensialet $\mathbf{A}(\mathbf{r}, t)$. Dette potensialet kan generelt skrives som en superposisjon av plane harmoniske bølger av typen

$$\mathbf{A}(\mathbf{r}, t) \propto e^{i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t)} \mathbf{e}_{\mathbf{k}} \quad (\omega = ck).$$

Her er enhetsvektoren \mathbf{e}_k en polarisasjonsvektor (som gir retningen til \mathcal{E} -feltet). Vi skal betrakte en enkel monokromatisk bølge

$$\mathbf{A}(\mathbf{r}, t) = 2A_0 \mathbf{e}_k \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t) = A_0 \left(\mathbf{e}_k e^{i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t)} + \text{kompleks-konj.} \right), \quad (\text{T15.16})$$

som svarer til feltene

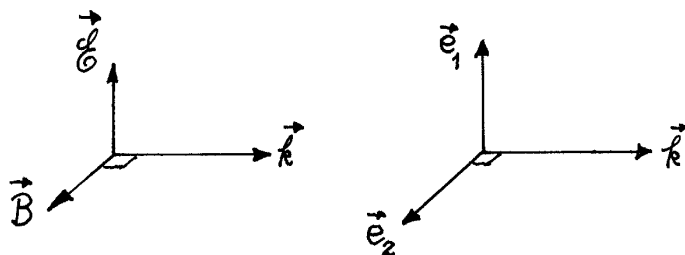
$$\mathcal{E} = -\frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} = -2\omega A_0 \mathbf{e}_k \sin(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t) \quad (\text{T15.17})$$

$$\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A} = -2A_0(\mathbf{k} \times \mathbf{e}_k) \sin(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t).$$

Her følger det fra Coulomb-justeringsbetingelsen

$$\nabla \cdot \mathbf{A} = A_0 \mathbf{e}_k \cdot \nabla \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t) = -A_0 \sin(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t) \mathbf{e}_k \cdot \mathbf{k} = 0, \quad (\text{T15.18})$$

at polarisasjonsvektoren \mathbf{e}_k er ortogonal på bølgetallsvektoren \mathbf{k} . Følgelig er \mathcal{E} transversal på \mathbf{k} , og \mathbf{B} er transversal på \mathbf{k} og \mathcal{E} , som illustrert i figuren til venstre.



Som vist i figuren til høyre, kan vi velge å arbeide med to reelle polarisasjonsvektorer \mathbf{e}_1 og \mathbf{e}_2 .³

Senere vil vi få bruk for sammenhengen mellom amplituden A_0 og energitettheten i bølgen, som er

$$\begin{aligned} \frac{1}{2}\epsilon_0 \mathcal{E}^2 + \frac{1}{2\mu_0} \mathbf{B}^2 &= \frac{1}{2}\epsilon_0 (\mathcal{E}^2 + c^2 \mathbf{B}^2) & (\mu_0 \epsilon_0 = 1/c^2) \\ &= \frac{1}{2}\epsilon_0 (2A_0)^2 \sin^2(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t) (\omega^2 + c^2 k^2). \end{aligned}$$

Midlet over tid er da energitettheten i den harmoniske bølgen (T15.16)

$$u = 2\epsilon_0 A_0^2 \omega^2. \quad (\text{T15.19})$$

Dette svarer til en energifluks $I = u c = 2\epsilon_0 A_0^2 \omega^2 c$.

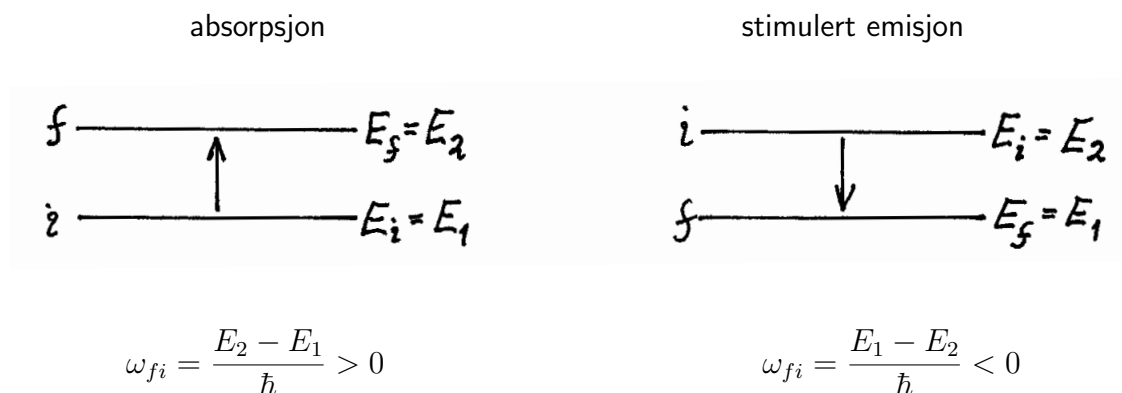
15.3 Overganger mellom atomære tilstander

(H 12.3, B&J 11.2, G 9.2)

I avsnittene 14.5 og 14.6 så vi på overganger av typen **diskret** \rightarrow **kontinuerlig** (f.eks ionisasjon) og **kontinuerlig** \rightarrow **kontinuerlig** (f.eks spredning på et statisk potensial), og

³Dersom vi ønsker å beskrive en bølge med f.eks sirkulær polarisasjon, må vi bruke en kompleks polarisasjonsvektor.

etablerte Fermis gyldne regel. Vi skal nå ta for oss overganger av typen **diskret** \rightarrow **diskret**, hvor en elektromagnetisk bølge stimulerer enten eksitasjon av et én-elektron-atom (via absorpsjon) eller de-eksitasjon (via stimulert emisjon):



Vi kan anta at den innkommende elektromagnetiske strålen er bygd opp av harmoniske bølger med en kvasi-kontinuerlig frekvensfordeling, slik at antallet harmoniske bølger i frekvensintervallet $\Delta\omega$ er $\rho(\omega)\Delta\omega$. Hver av disse bølgene er av typen (T15.16), med en amplitude $A_0(\omega)$. Vi kan anta at alle komponentbølgene i strålen har omtrent samme forplantningsretning $\hat{k} = \mathbf{k}/k$ og polarisasjonsvektor \mathbf{e}_k .

Med elektronladningen $q = -e$ følger det fra (T15.15) og (T15.16) at vekselvirkningsleddet som skyldes bare én slik harmonisk bølge kan skrives på standardformen (T14.24) for en harmonisk perturbasjon:

$$\begin{aligned} \widehat{H}'_1 &= -\frac{q}{m} \mathbf{A} \cdot \hat{\mathbf{p}} = \frac{e}{m} A_0(\omega) \hat{\mathbf{p}} \cdot (\mathbf{e}_k e^{i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t)} + \text{c.c.}) \\ &\equiv \widehat{\mathcal{V}}(\mathbf{r}, \omega) e^{-i\omega t} + \widehat{\mathcal{V}}^\dagger(\mathbf{r}, \omega) e^{+i\omega t}, \end{aligned}$$

der

$$\widehat{\mathcal{V}}(\mathbf{r}, \omega) = \frac{e}{m} A_0(\omega) \mathbf{e}_k \cdot \hat{\mathbf{p}} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}}. \quad (\text{T15.20})$$

15.3.a Stimulert emisjon like sannsynlig som absorpsjon

Ifølge (T14.35–37) er overgangssannsynlighetene pr tidsenhet (overgangs-ratene) for stimulert emisjon og absorpsjon på grunn av én slik harmonisk bølge like store, gitt ved

$$\begin{aligned} w_{2 \rightarrow 1} = w_{1 \rightarrow 2} &= \frac{2\pi}{\hbar} |\mathcal{V}_{21}(\omega)|^2 \delta(E_2 - E_1 - \hbar\omega) \\ &= \frac{2\pi}{\hbar^2} |\mathcal{V}_{21}|^2 \delta(\omega_{21} - \omega) \quad \left(\omega_{21} = \frac{E_2 - E_1}{\hbar} \right). \end{aligned}$$

Spørsmålet er da hva som skjer når vi perturberer med en stråle som består av en hel bøling med slike harmoniske bølger? Svaret er at dersom strålen er en **inkohærent** blanding av harmoniske bølger, så kan vi ganske enkelt addere overgangs-ratene for alle de harmoniske bølgene; bidragene fra de enkelte harmoniske bølgene interfererer ikke. Det samme gjelder når vi skal beregne energitettheten i strålen. Sammenholdt med (T15.19) betyr det siste at frekvensintervallet $d\omega$, som inneholder $\rho(\omega)d\omega$ enkeltbølger, gir et bidrag

$$2\epsilon_0 A_0^2(\omega) \omega^2 \cdot \rho(\omega) d\omega \equiv u(\omega) d\omega \quad (\text{T15.21})$$

til den totale energitettheten i strålen. [$u(\omega)$ er da energitettheten pr frekvensenhet, også kalt den spektrale energitettheten.]

Hver av de $\rho(\omega)d\omega$ bølgene i dette frekvensintervallet gir tilsvarende et bidrag

$$(2\pi/\hbar^2)|\mathcal{V}_{21}|^2\delta(\omega_{21} - \omega)$$

til de to overgangsratene. Ved å integrere over frekvensen finner vi da de totale overgangsratene:

$$\begin{aligned} w_{2\rightarrow 1} = w_{1\rightarrow 2} &= \frac{2\pi}{\hbar^2} \int |\mathcal{V}_{21}|^2 \delta(\omega_{21} - \omega) \cdot \rho(\omega) d\omega \\ &= \frac{2\pi}{\hbar^2} \frac{e^2}{m^2} A_0^2(\omega_{21}) \rho(\omega_{21}) \left| \mathbf{e}_{\mathbf{k}} \cdot \langle \psi_2 | \hat{\mathbf{p}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} | \psi_1 \rangle \right|^2. \end{aligned}$$

Fra (T15.21) har vi at

$$A_0^2(\omega_{21}) \rho(\omega_{21}) = \frac{u(\omega_{21})}{2\epsilon_0 \omega_{21}^2},$$

som tillater oss å uttrykke resultatene våre ved den spektrale energitettheten $u(\omega)$:

$$w_{2\rightarrow 1} = w_{1\rightarrow 2} = \frac{\pi}{\hbar^2} \frac{e^2}{m^2} \frac{u(\omega_{21})}{\epsilon_0 \omega_{21}^2} \left| \mathbf{e}_{\mathbf{k}} \cdot \langle \psi_2 | \hat{\mathbf{p}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} | \psi_1 \rangle \right|^2. \quad (\text{T15.22})$$

15.3.b Dipol-tilnærmelsen

For en overgang mellom tilstander for de ytre elektronene i et atom er Bohr-frekvensen ω_{21} typisk av størrelsesorden

$$\omega_{21} = \frac{E_2 - E_1}{\hbar} \sim \frac{10 \text{ eV}}{\hbar} \sim 10^{16} \text{ s}^{-1}.$$

Overgangene $1 \rightarrow 2$ og $2 \rightarrow 1$ induseres da av stråling med en bølgelengde i eller like i nærheten av det synlige området,

$$\lambda \sim \frac{2\pi c}{\omega} \sim 10^{-7} \text{ m}.$$

Denne er en faktor 10^3 større enn radiene til de aktuelle orbitalene ψ_1 og ψ_2 . I matrise-elementet

$$\langle \psi_2 | \hat{\mathbf{p}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} | \psi_1 \rangle = \int \psi_2^* \hat{\mathbf{p}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \psi_1 d^3r$$

kan vi derfor utvikle eksponensialfunksjonen $\exp(i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r})$ i en hurtigkonvergerende rekke:

$$e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} = 1 + i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r} - \frac{1}{2}(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r})^2 + \dots$$

Siden $\mathbf{k}\cdot\mathbf{r} \sim 2\pi r/\lambda \ll 1$, skjønner vi at det første ikke-forsvinnende leddet i den resulterende utviklingen av integralet ovenfor gir en god tilnærming til hele matrise-elementet. Det første leddet, $\exp(i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}) \approx 1$, gir den såkalte **elektrisk-dipol-tilnærmelsen**. Dersom det første ikke-forsvinnende bidraget til integralet kommer fra det neste leddet i utviklingen, $i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}$, har vi å gjøre med magnetisk-dipol- og elektrisk-kvadrupol-stråling, og vi skjønner at det kvadrerte matrise-elementet da vil gi en mye mindre overgangsrate.

Elektrisk-dipol-tilnærmelsen

For tilfeller der det første leddet ($e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \approx 1$) bidrar, kan vi forenkle matrise-elementet, ved hjelp av noen små grep. Fra avsnitt 15.2.a husker vi for det første at tilstandene ψ_1 og ψ_2 er egentilstander til den uperturberte Hamilton-operatoren, “partikkel-delen” \widehat{H}_p :

$$\widehat{H}_p \psi_n = \left[\frac{\widehat{\mathbf{p}}^2}{2m} + V_C(\mathbf{r}) \right] \psi_n = E_n \psi_n; \quad n = 1, 2. \quad (\text{T15.23})$$

For det andre kan vi merke oss at

$$[\widehat{H}_p, x] = \frac{1}{2m} [\widehat{p}_x^2, x] = \frac{1}{2m} \{ \widehat{p}_x [\widehat{p}_x, x] + [\widehat{p}_x, x] \widehat{p}_x \} = \frac{\hbar}{im} \widehat{p}_x, \quad (\text{T15.24})$$

som vi generaliserer til

$$\widehat{\mathbf{p}} = \frac{im}{\hbar} [\widehat{H}_p, \mathbf{r}]. \quad (\text{T15.25})$$

I elektrisk-dipol-tilnærmelsen (som vi ofte bare kaller dipoltilnærmelsen) har vi da fra (T15.23)

$$\begin{aligned} \langle \psi_2 | \widehat{\mathbf{p}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} | \psi_1 \rangle &\approx \langle \psi_2 | \widehat{\mathbf{p}} | \psi_1 \rangle = \frac{im}{\hbar} \langle \psi_2 | \widehat{H}_p \mathbf{r} - \mathbf{r} \widehat{H}_p | \psi_1 \rangle \\ &= \frac{im}{\hbar} \langle \psi_2 | E_2 \mathbf{r} - \mathbf{r} E_1 | \psi_1 \rangle = im \frac{E_2 - E_1}{\hbar} \langle \psi_2 | \mathbf{r} | \psi_1 \rangle \\ &\equiv im\omega_{21} \mathbf{d}_{21}. \end{aligned} \quad (\text{T15.26})$$

Her kalles

$$\mathbf{d}_{21} \equiv \langle \psi_2 | \mathbf{r} | \psi_1 \rangle = \int \psi_2^* \mathbf{r} \psi_1 d^3r \quad (\text{T15.27})$$

dipolmomentet for overgangen. Ved innsetting i (T15.22) kan vi da uttrykke overgangsratene for absorpsjon og stimulert emisjon i dipoltilnærmelsen som følger:

$$\boxed{w_{1 \rightarrow 2} = w_{2 \rightarrow 1} = \frac{\pi e^2}{\hbar^2 \epsilon_0} u(\omega_{21}) |\mathbf{e}_{\mathbf{k}} \cdot \mathbf{d}_{21}|^2.} \quad \left(\begin{array}{l} \text{elektrisk-dipol-} \\ \text{tilnærmelsen} \end{array} \right) \quad (\text{T15.28})$$

Her er $u(\omega)$ den spektrale energitettheten (energi pr volum- og vinkelfrekvens-enhet) i strålen.

15.4 Spontan emisjon via Einsteins likevektsresonnement

(H 12.4, B&J 11.3, G 9.3)

At overgangsratene for absorpsjon og stimulert emisjon må være like store ble vist av Einstein alt i 1917, åtte år før den kvantemekaniske teorien ble stablet på beina.

15.4.a Einsteins likevektsresonnement

Som vi gjennomgikk i avsnitt 8.3.d i Tillegg 8, betraktet Einstein et ensemble av atomer i likevekt med termisk stråling ved en temperatur T . La oss like godt gå raskt gjennom Einsteins resonnement en gang til. Ved likevekt er den spektrale energitettheten gitt ved Plancks lov (T8.53), som

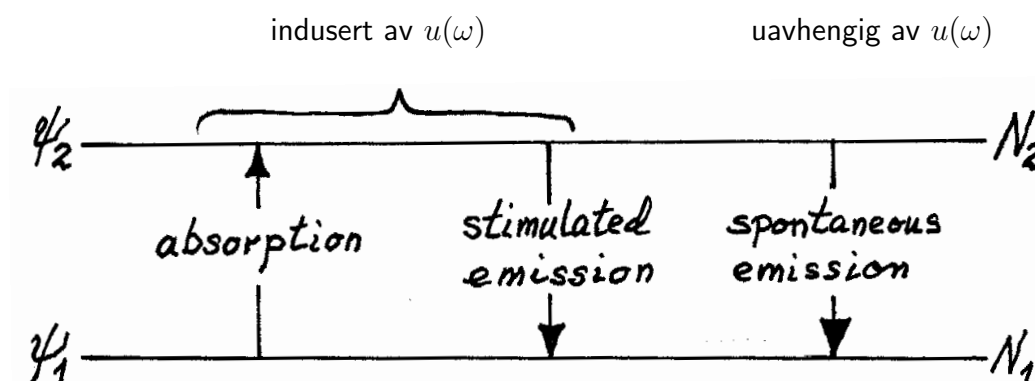
$$u(\omega) = \frac{u(\nu)d\nu}{d\omega} = \frac{\hbar\omega^3}{\pi^2 c^3} \frac{1}{e^{\hbar\omega/kT} - 1}. \quad (\text{T15.29})$$

Videre er forholdet mellom antall atomer i tilstandene ψ_1 og ψ_2 gitt ved Boltzmann-faktoren

$$\frac{N_1}{N_2} = e^{-i(E_1-E_2)/kT} = e^{\hbar\omega/kT}, \quad (\text{T15.30})$$

der $\omega = \omega_{21}$. For hvert av atomene som er i tilstanden ψ_2 er det en viss overgangsrate $w_{2 \rightarrow 1}^{\text{sp}} = A$ for spontan emisjon og de-eksitasjon til tilstanden ψ_1 . Denne spontane overgangsraten er uavhengig av temperaturen; spontane overganger skjer akkurat like hyppig også i fravær av stråling.

Overgangsraten $B_{1 \rightarrow 2}u(\omega)$ for absorpsjon, derimot, er proporsjonal med $u(\omega)$. Det samme viser seg å være tilfelle for raten for stimulert emisjon, $B_{2 \rightarrow 1}u(\omega)$. Slik var det de tre Einstein-koeffisientene, A , $B_{1 \rightarrow 2}$ og $B_{2 \rightarrow 1}$, kom inn i bildet.



Rate pr atom:	$B_{1 \rightarrow 2} u(\omega)$	$B_{2 \rightarrow 1} u(\omega)$	A
Totale rater:	$N_1 B_{1 \rightarrow 2} u(\omega)$	$N_2 B_{2 \rightarrow 1} u(\omega)$	$N_2 A$

Ved likevekt må de tre ratene balansere hverandre; ved hjelp av (T15.30) har vi da at

$$\begin{aligned} \frac{dN_1}{dt} &= N_2(A + B_{2 \rightarrow 1})u(\omega) - N_1 B_{1 \rightarrow 2}u(\omega) \\ &= N_2 \left[A + B_{2 \rightarrow 1}u(\omega) - e^{\hbar\omega/kT} B_{1 \rightarrow 2}u(\omega) \right] = 0, \end{aligned}$$

eller, ved å løse for $u(\omega)$,

$$u(\omega) = \frac{A}{B_{1 \rightarrow 2}} \frac{1}{e^{\hbar\omega/kT} - B_{2 \rightarrow 1}/B_{1 \rightarrow 2}}.$$

Ved å sammenligne med Plancks strålingslov (T15.29) ser vi da at

$$B_{1 \rightarrow 2} = B_{2 \rightarrow 1} \equiv B \quad \text{og} \quad A = \frac{\hbar\omega^3}{\pi^2 c^3} B_{1 \rightarrow 2}. \quad (\text{T15.31})$$

Einsteins resultater kan altså oppsummeres slik:

Overgangsraten $B_{2 \rightarrow 1}u(\omega)$ for stimulert emisjon er eksakt den samme som for absorpsjon, $B_{1 \rightarrow 2}u(\omega)$, dvs,

$$B_{2 \rightarrow 1} = B_{1 \rightarrow 2},$$

(T15.32)

og

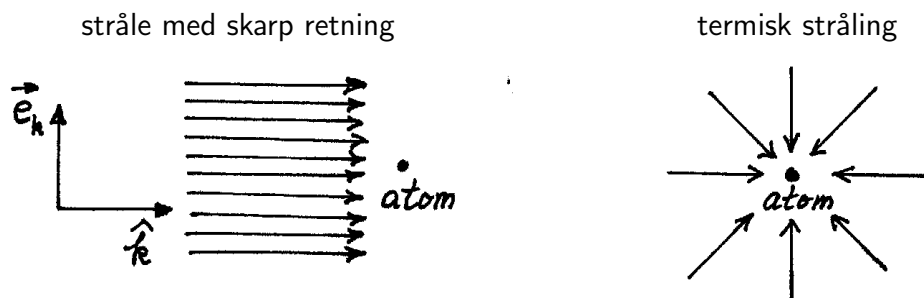
Forholdet mellom ratene for spontan emisjon og absorpsjon er gitt ved

$$\frac{A}{B_{1 \rightarrow 2} u(\omega)} = \frac{\hbar \omega^3}{\pi^2 c^3} \frac{1}{u(\omega)} = e^{\hbar \omega / kT} - 1. \quad (\text{T15.33})$$

15.4.b Tilnæringsformel for $B_{1 \rightarrow 2} = B_{2 \rightarrow 1}$

I 1917, før kvantemekanikken, var Einstein bare i stand til å finne *forholdet* mellom de tre koeffisientene sine. Med kvantemekanikken på plass har vi nå mulighet for å finne *størrelsen* av ratene for absorpsjon og stimulert emisjon. Dette kan gjøres ved hjelp av resultatet som vi fant for strålen i avsnitt 15.3.b.

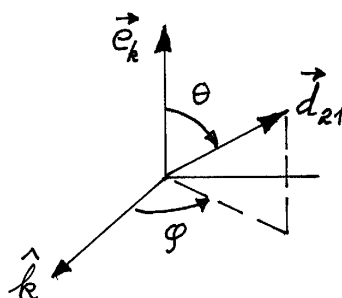
I motsetning til strålen er den *termiske* strålingen isotropt fordelt over alle vinkler, og den er også upolarisert.



La oss derfor foreta et sceneskifte, og betrakte tilfellet illustrert til høyre, hvor energitettheten $u(\omega)$ pr vinkelfrekvens-enhet er isotropt fordelt. Vi må da midle resultatet for strålen,

$$w_{1 \rightarrow 2} = w_{2 \rightarrow 1} = \frac{\pi e^2}{\hbar^2 \epsilon_0} u(\omega_{21}) |\mathbf{e}_{\mathbf{k}} \cdot \mathbf{d}_{21}|^2,$$

over alle retninger for \mathbf{k} og også over polarisasjoner.



Dette er ekvivalent med å midle $|\mathbf{e}_{\mathbf{k}} \cdot \mathbf{d}_{21}|^2 = |\mathbf{d}_{21}|^2 \cos^2 \theta$ over alle retninger av \mathbf{d}_{21} . Med ⁴

$$\overline{\cos^2 \theta} = \frac{1}{4\pi} \int_0^{2\pi} d\phi \int_{-1}^1 d(\cos \theta) \cos^2 \theta = \frac{1}{3}$$

⁴Faktoren 1/3 holder også for det tilfellet at \mathbf{d}_{21} er kompleks. Da kan $\Re(\mathbf{d}_{21})$ og $\Im(\mathbf{d}_{21})$ peke i forskjellige retninger (θ_R og θ_I) i forhold til $\mathbf{e}_{\mathbf{k}}$. I slike tilfeller har vi at

$$|\mathbf{e}_{\mathbf{k}} \cdot (\Re(\mathbf{d}_{21}) + i\Im(\mathbf{d}_{21}))|^2 = |\mathbf{e}_{\mathbf{k}} \cdot \Re(\mathbf{d}_{21})|^2 + |\mathbf{e}_{\mathbf{k}} \cdot \Im(\mathbf{d}_{21})|^2$$

finner vi at ratene for absorpsjon og stimulert emisjon ganske enkelt er

$$w_{1 \rightarrow 2} = w_{2 \rightarrow 1} = \frac{\pi e^2}{3\hbar^2 \epsilon_0} u(\omega_{21}) |\mathbf{d}_{21}|^2 \quad (\text{isotrop tilfelle}) \quad (\text{T15.34})$$

når $u(\omega_{21})$ er isotropt fordelt.

Så nå er vi et skritt foran der Einstein var i 1917: For *størrelsen* av B -koeffisienten er resultatet vårt (til første orden i perturbasjonen, og i dipoltilnærmelsen)

$$B_{1 \rightarrow 2} = \frac{w_{1 \rightarrow 2}}{u(\omega_{21})} = \frac{\pi e^2}{3\hbar^2 \epsilon_0} |\langle \psi_2 | \mathbf{r} | \psi_1 \rangle|^2 = B_{2 \rightarrow 1}. \quad (\text{T15.35})$$

Kan vi stole på dette resultatet, som er utledet ved hjelp av halvklassisk strålingsteori? Svaret er ja: Resultatet stemmer med det en finner ved hjelp av **ikke-relativistisk kvanteelektrodynamikk**, hvor også strålingsfeltet kvantiseres, og hvor en beskriver kreasjon og annihilasjon av fotoner.

15.4.c Tilnærmet resultat for spontan emisjon

Kan den halvklassiske strålingsteorien også brukes til å beregne raten for *spontan* emisjon? Svaret er nei: I fravær av stråling er vekselvirkningsleddene i (T15.14) og (T15.15) lik null, og da vil det ifølge den halvklassiske strålingsteorien ikke skje noen de-eksitasjon.

Men her er det at Einstein kommer og redder oss. Ifølge hans likevektsresonnement *skjer* det jo en de-eksitasjon via spontan emisjon, med en overgangssannsynlighet pr tidsenhet (rate) som pr atom er

$$w_{2 \rightarrow 1}^{\text{sp}} = A = \frac{\hbar \omega_{21}^3}{\pi^2 c^3} B_{1 \rightarrow 2} = \frac{e^2 \omega_{21}^3}{3\pi \epsilon_0 \hbar c^3} |\mathbf{d}_{21}|^2$$

eller, med $\alpha = e^2/(4\pi\epsilon_0\hbar c) \approx 1/137.036$,

$$\boxed{w_{2 \rightarrow 1}^{\text{sp}} = A = \alpha \frac{4\omega_{21}^3}{3c^2} |\langle \psi_2 | \mathbf{r} | \psi_1 \rangle|^2.} \quad \left(\begin{array}{c} \text{spontan} \\ \text{emisjonsrate} \end{array} \right) \quad (\text{T15.36})$$

I likhet med formelen for $B_{1 \rightarrow 2}$ er denne gyldig til første orden, og i elektrisk-dipol-tilnærmelsen.

Kan dette resultatet beregnes direkte? Ja, dersom vi kvantiserer strålingsfeltet som alt nevnt, og bruker første-ordens perturbasjonsteori, så er det en smal sak å vise at den spontane de-eksitasjonsraten fra ψ_2 til ψ_1 , under emisjon av et foton med polarisasjon $\mathbf{e}_{\mathbf{k}}$ i en retning innenfor romvinkelen $d\Omega$, er

$$\begin{aligned} dw_{2 \rightarrow 1}^{\text{sp}} &= \frac{\alpha}{2\pi} \frac{\omega_{21}}{m^2 c^2} \left| \mathbf{e}_{\mathbf{k}}^* \cdot \langle \psi_1 | e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} \hat{\mathbf{p}} | \psi_2 \rangle \right|^2 d\Omega \\ &= \frac{\alpha}{2\pi} \frac{\omega_{21}}{m^2 c^2} \left| \mathbf{e}_{\mathbf{k}} \cdot \langle \psi_2 | e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} \hat{\mathbf{p}} | \psi_1 \rangle \right|^2 d\Omega. \\ &= |\Re(\mathbf{d}_{21})|^2 \cos^2 \theta_R + |\Im(\mathbf{d}_{21})|^2 \cos^2 \theta_I. \end{aligned}$$

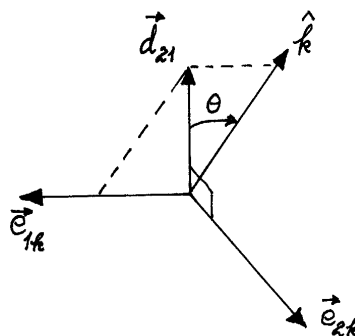
Ved å midle over $\cos^2 \theta_R$ og $\cos^2 \theta_I$ får vi da

$$|\Re(\mathbf{d}_{21})|^2 \cdot \frac{1}{3} + |\Im(\mathbf{d}_{21})|^2 \cdot \frac{1}{3} = \frac{1}{3} |\mathbf{d}_{21}|^2, \quad \text{q.e.d.}$$

Her kan vi igjen bruke dipol-tilnærmelsen (jf (T15.26)), $\langle \psi_2 | e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \hat{\mathbf{p}} | \psi_1 \rangle = im\omega_{21} \langle \psi_2 | \mathbf{r} | \psi_1 \rangle$, til å forenkle resultatet til

$$\frac{dw_{2\rightarrow 1}^{\text{sp}}}{d\Omega} = \alpha \frac{\omega_{21}^3}{2\pi c^2} |\mathbf{e}_{\mathbf{k}} \cdot \langle \psi_2 | \mathbf{r} | \psi_1 \rangle|^2 \quad (\text{dipol-tiln.}). \quad (\text{T15.37})$$

En liten oppgave:



$$\mathbf{e}_{1\mathbf{k}} \text{ i planet gjennom } \hat{\mathbf{k}} \text{ og } \mathbf{d}_{21} \implies \mathbf{e}_{2\mathbf{k}} \perp \mathbf{d}_{21}$$

Anta at $\langle \psi_2 | \mathbf{r} | \psi_1 \rangle = \mathbf{d}_{21}$ er reell, og betrakt et foton som emitteres i retningen $\hat{\mathbf{k}}$.

- Hvorfor er fotonet polarisert i planet gjennom $\hat{\mathbf{k}}$ og \mathbf{d}_{21} ? [Hint: La $\mathbf{e}_{1\mathbf{k}}$ være en polarisasjonsvektor *i* dette planet, og la $\mathbf{e}_{2\mathbf{k}}$ være ortogonal på $\mathbf{e}_{1\mathbf{k}}$, $\hat{\mathbf{k}}$ og dermed på \mathbf{d}_{21} . Hva er da $dw_{2\rightarrow 1}^{\text{sp}}/d\Omega$ for fotoner med $\mathbf{e}_{\mathbf{k}} = \mathbf{e}_{1\mathbf{k}}$?]
- Uttrykk $dw_{2\rightarrow 1}^{\text{sp}}/d\Omega$ ved vinkelen θ_{kd} mellom $\hat{\mathbf{k}}$ og \mathbf{d}_{21} . Vis at (T15.36) følger ved integrasjon over denne vinkelen.

15.5 Utvalgsregler for elektrisk-dipol-stråling

(H 12.5, B&J pp 530–541, G 9.3)

15.5.a Utvalgsregler

Som vi nettopp har sett, bestemmes overgangsratene i elektrisk-dipol-tilnærmelsen av matrise-elementene (“dipolmomentene”)

$$\mathbf{d}_{fi} = \int \psi_f^*(\mathbf{r}) \mathbf{r} \psi_i(\mathbf{r}) d^3r.$$

Utvalgsreglene (i elektrisk-dipol-tilnærmelsen) er enkle regler som forteller oss *når* disse matrise-elementene er forskjellige fra null.

Det enkleste tilfellet har vi når partikkelen beveger seg i et kulesymmetrisk potensial, med en begynnelsestilstand

$$\psi_i(\mathbf{r}) = R_{nl}(r) Y_{lm}(\theta, \phi).$$

Det viser seg da at matrise-elementene \mathbf{d}_{fi} er forskjellig fra null bare for et *utvalg* av slutttilstander

$$\psi_f(\mathbf{r}) = R_{n'l'}(r) Y_{l'm'}(\theta, \phi),$$

slik at *sprangene* i kvantetall begrenses til

$$\boxed{\Delta m \equiv m' - m = 0, \pm 1} \quad \text{og} \quad \boxed{\Delta l \equiv l' - l = \pm 1.} \quad \left(\begin{array}{l} \text{utvalgsreglene i elektrisk-} \\ \text{dipol-tilnærmelsen} \end{array} \right) \quad (\text{T15.38})$$

For overganger som ikke oppfyller disse betingelsene er dipolmomentene \mathbf{d}_{fi} lik null. Vi sier da at disse overgangene er “forbudte i dipol-tilnærmelsen”. Dette betyr ikke at slike overganger er absolutt forbudte; reglene ovenfor forteller bare at det første leddet i utviklingen $\exp(\pm i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}) = 1 \pm i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r} + \dots$ ikke bidrar til matrise-elementet i (T15.22). Høyere-ordens ledd i utviklingen *kan* bidra, men vi skjønner at overgangsratene i slike tilfeller vil bli mye mindre enn for overganger som er *tillatte* i elektrisk-dipol-tilnærmelsen.

Hvordan vi beviser disse reglene

Ved å starte med identiteten

$$\begin{aligned} \mathbf{r} &= \hat{\mathbf{e}}_x r \sin \theta \cos \phi + \hat{\mathbf{e}}_y r \sin \theta \sin \phi + \hat{\mathbf{e}}_z r \cos \theta \\ &= r \sqrt{\frac{4\pi}{3}} \left[\hat{\mathbf{e}}_z Y_{10} - \frac{\hat{\mathbf{e}}_x - i\hat{\mathbf{e}}_y}{\sqrt{2}} Y_{11} + \frac{\hat{\mathbf{e}}_x + i\hat{\mathbf{e}}_y}{\sqrt{2}} Y_{1,-1} \right], \end{aligned} \quad (\text{T15.39})$$

innser vi at matrise-elementet \mathbf{d}_{fi} kan skrives som et produkt av radialintegralet

$$I_{\text{rad}} \equiv \int_0^\infty R_{n'l'}(r) r R_{nl}(r) r^2 dr \quad (\text{T15.40})$$

og en lineærkombinasjon av tre vinkelintegraler av typen

$$J_{m''} \equiv \sqrt{\frac{4\pi}{3}} \int Y_{l'm'}^* Y_{1m''} Y_{lm} d\Omega, \quad (\text{T15.41})$$

hvor $m'' = 0, +1$ eller -1 . Siden pariteten til Y_{lm} er $(-1)^l$, følger det at pariteten til integranden i (T15.41) er

$$(-1)^{l'+1+l} = (-1)^{2l} (-1)^{l'-l+1} = (-1)^{\Delta l+1}.$$

Dersom Δl er *like*, er altså integranden antisymmetrisk, slik at integralene $J_{m''}$ og dermed \mathbf{d}_{fi} er lik null. Følgelig må Δl være odde for å gi et dipolmoment som er forskjellig fra null.

Videre merker vi oss at vinkelintegralet $J_{m''}$ inneholder faktoren

$$\int_0^{2\pi} e^{i\phi(m-m'+m'')} d\phi = \int_0^{2\pi} e^{i\phi(m''-\Delta m)} d\phi = 2\pi \delta_{m'', \Delta m},$$

som er lik null unntatt for $\Delta m = m'' = 0, \pm 1$. Dette beviser “ Δm -delen” av utvalgsreglene, og gjør at vi kan skrive matrise-elementet på formen

$$\mathbf{d}_{fi} = I_{\text{rad}} \left(\hat{\mathbf{e}}_z J_0 \delta_{m',m} - \frac{\hat{\mathbf{e}}_x - i\hat{\mathbf{e}}_y}{\sqrt{2}} J_1 \delta_{m',m+1} + \frac{\hat{\mathbf{e}}_x + i\hat{\mathbf{e}}_y}{\sqrt{2}} J_{-1} \delta_{m',m-1} \right), \quad (\text{T15.42})$$

hvor J_0 , J_1 og J_{-1} er gitt av (T15.41).

Det gjenstår da bare å vise hvorfor de odde sprangene Δl begrenser seg til ± 1 . Her kan vi skille mellom tilfellene $l = 0$ og $l \geq 1$: I det første tilfellet, dersom begynnelsestilstanden er en s -tilstand, med $Y_{lm} = Y_{00} = 1/\sqrt{4\pi}$, forenkler vinkelintegralene seg til

$$J_{m''} = \sqrt{1/3} \int Y_{l'm'}^* Y_{1m''} d\Omega = \sqrt{1/3} \delta_{l',1} \delta_{m',m''}.$$

I dette tilfellet må altså slutt-tilstanden være en p -bølge ($l' = 1$), slik at $\Delta l = l' - l = 1$.

For $l \geq 1$ er det mer komplisert. Det kan vises at produktet av de to siste faktorene i (T15.41) kan skrives som en lineærkombinasjon av to sfæriske harmoniske:

$$Y_{1m''}(\theta, \phi) Y_{lm}(\theta, \phi) = A Y_{l-1, m+m''}(\theta, \phi) + B Y_{l+1, m+m''}(\theta, \phi), \quad (l \geq 1, m'' = 0, \pm 1), \quad (\text{T15.43})$$

der koeffisientene A og B selvsagt avhenger av l , m og m'' . Ved å sette uttrykket ovenfor inn i (T15.41) ser vi at utvalgsregelen $\Delta l \equiv l' - l = \pm 1$ følger fra ortogonaliteten til de sfæriske harmoniske.

At produktet ovenfor kan utvikles i sfæriske harmoniske er trivielt, siden de sistnevnte danner en basis for vinkelrommet. At det magnetiske kvantetallet på høyresiden ovenfor er $m + m''$ følger like trivielt fra at $Y_{lm}(\theta, \phi) \propto \exp(im\phi)$. At det bare er $l - 1$ og $l + 1$ som bidrar i utviklingen ovenfor, henger sammen med addisjonsreglene for dreieimpulser, og er ikke fullt så trivielt. Dette er vist i et Appendiks helt til slutt i dette tillegget. Et alternativ (formulert av Dirac) til beviset nedenfor finner du side 361 i Griffiths.

En liten oppgave:

a) Produktet

$$Y_{11} Y_{20} = -\sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \theta e^{i\phi} \cdot \sqrt{\frac{5}{16\pi}} (3 \cos^2 \theta - 1)$$

kan uttrykkes ved to sfæriske harmoniske. Hvilke?

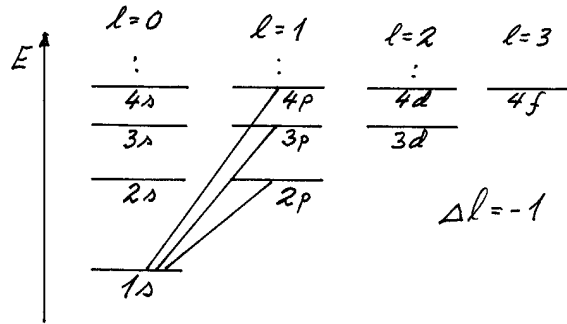
b) Sjekk at

$$Y_{10} Y_{20} = \frac{3}{2} \sqrt{\frac{3}{35\pi}} Y_{30} + \sqrt{\frac{1}{5\pi}} Y_{10}.$$

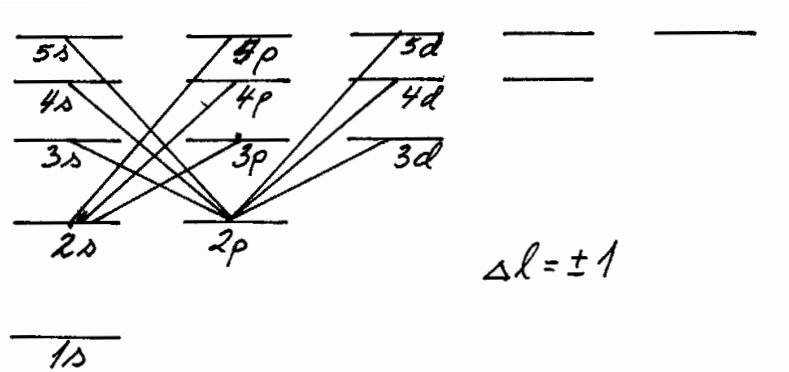
c) Hva er retningen til vektoren \mathbf{d}_{fi} for en overgang med $\Delta m = 0$?

15.5.b Eksempler, for hydrogen

Atomære spektra gir direkte beskjed om energi-sprangene mellom de forskjellige nivåene i atomer. Figuren nedenfor illustrerer elektrisk-dipol-overganger fra eksiterte tilstander til grunntilstanden $1s$ ($n = 1, l = 0$) for hydrogen. Begynnelsestilstanden må da være en p -tilstand, slik at $\Delta l = -1$. Den laveste fotonenergien er her ca 10.2 eV. Derfor ligger hele denne serien av spektrallinjer i det ultrafiolette området. Disse linjene er kjent som **Lyman-serien**.



Overganger til 2s og 2p



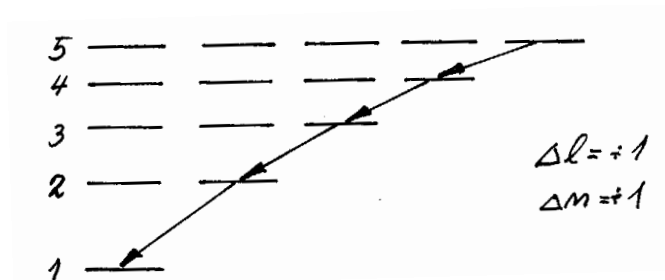
Her er energisprangene

$$\Delta E = -\frac{1}{2}\alpha^2 mc^2 \left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{n^2} \right) \quad (n = 3, 4, \dots)$$

av størrelsesorden 2 eV, som svarer til spektrallinjer i den sylige delen av spektret. Disse linjene danner den såkalte **Balmer-serien** (Balmer, ca 1885), som var utgangspunktet for Balmers empiriske formel (se Tillegg 1). Denne var som vi husker en del av bakgrunnen for Bohrs atommodell.

Kaskade

Som illustrert ovenfor er det ingen utvalgsregel som begrenser de mulige sprangene Δn i hovedkvantetallet. Imidlertid kan det skje (bl.a under såkalt **rekombinering** av frie protoner og elektroner) at et hydrogenatom havner i en høyt eksitert tilstand der l har sin maksimale verdi, som er $n - 1$.



Som illustrert i figuren, er da elektrisk-dipol-overganger bare mulige for $\Delta n = \Delta l = -1$. På den måten får vi en **kaskade** av overganger, med spektrallinjer som svarer til en hel serie av energisprang mellom naborivåer.

15.5.c Levetid. Linjebredde

Det er viktig å ha klart for seg at den spontane overgangsraten

$$w_{i \rightarrow f}^{\text{sp}} = \alpha \frac{4\omega_{if}^3}{3c^2} |\mathbf{d}_{fi}|^2,$$

gir *sannsynligheten* pr tidsenhet for overgangen $\psi_i \rightarrow \psi_f$ pr atom. Dette betyr at vi er helt ute av stand til å forutsi teoretisk hva som vil skje med ett enkelt atom, hverken hvor fotonet vil havne eller når det kommer. "Levetiden" for ett enkelt eksitert atom kan derfor ikke beregnes.

Så for å sammenligne teorien med eksperimenter må vi preparere et *ensemble* med et stort antall atomer i begynnelsestilstanden ψ_i . Med $N(t)$ atomer i tilstanden ψ_i ved tiden t sier teorien vår at det forventede antallet overganger til tilstanden ψ_f i løpet av tidsintervallet $(t, t + dt)$ er

$$dN_f = N(t)w_{i \rightarrow f}^{\text{sp}} dt.$$

Ved å summere over alle de mulige slutt-tilstandene ψ_f finner vi da at den forventede endringen av $N(t)$ i intervallet dt er

$$dN = - \sum_f dN_f = -N(t) w_i dt.$$

Her er

$$w_i = \sum_f w_{i \rightarrow f}^{\text{sp}} \quad (\text{T15.44})$$

den totale de-eksitasjonsraten for tilstanden ψ_i . Ved å integrere fra null til t i ligningen

$$\frac{dN}{N(t)} = -w_i dt$$

finner vi da straks at

$$N(t) = N(0) e^{-w_i t} \equiv N(0) e^{-t/\tau_i}; \quad \tau_i \equiv \frac{1}{w_i}. \quad (\text{T15.45})$$

Her er $\tau_i \equiv 1/w_i$ pr definisjon **levetiden** for tilstanden ψ_i .

En liten oppgave:

Vis at τ_i faktisk er den gjennomsnittlige levetiden for ensemblet $N(0)$. [Hint: Det forventede antallet som "dør" i intervallet $(t, t + dt)$ er $|dN| = w_i N(t) dt$.]

Som et eksempel kan vi se på hydrogenatomet, der vi velger begynnelsestilstanden $\psi_i = \psi_{210}$. Da er det bare én mulig overgang, til grunntilstanden ψ_{100} . Med et dipolmoment $|\mathbf{d}_{fi}|$ av størrelsesorden a_0 og en Bohr-frekvens $\omega_{21} \sim 10^{16} \text{ s}^{-1}$ finner vi da en overgangsrate

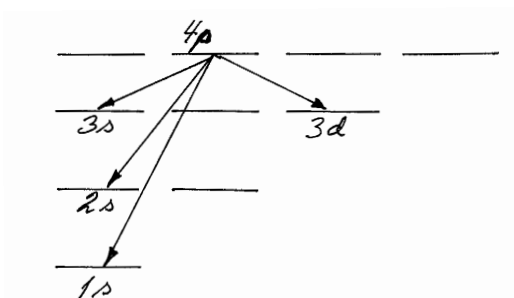
$$w_{i \rightarrow f} \sim \alpha \frac{\omega_{21}^3}{c^2} |a_0|^2 \sim 10^{-2} \frac{10^{48}}{10^{17}} 10^{-20} \text{ s}^{-1} = 10^9 \text{ s}^{-1}.$$

Levetiden for tilstanden $\psi_i = \psi_{210}$ er derfor av størrelsesorden

$$\tau_i = \frac{1}{w_i} \sim 10^{-9} \text{ s.}$$

Her kan vi merke oss at levetiden er mye lengre enn den “naturlige perioden” $T \sim 2\pi/\omega_{21} \sim 10^{-16}$ s for hydrogenatomet.

Som et annet eksempel kan vi velge begynnelsestilstanden ψ_{410} .



De mulige slutt-tilstandene er da (ifølge utvalgsreglene i dipoltilnærmelsen) de tre $3d$ -tilstandene ψ_{320} , ψ_{321} og $\psi_{32,-1}$, sammen med s -tilstandene ψ_{300} , ψ_{200} og ψ_{100} . Alle disse overgangene bidrar til den totale de-eksitasjonsraten (T15.44).

Merk ellers at overgangen fra ψ_{200} til ψ_{100} er “forbudt” i dipoltilnærmelsen. De-eksitasjonen skjer her hovedsaklig via to-foton-emisjon, med en rate som er mye mindre enn i eksemplet ovenfor. Levetiden for denne tilstanden viser seg å være så lang som ~ 0.1 s. Slike “seig-livede” tilstander kalles ofte **metastabile** tilstander.

Naturlig linjebredde

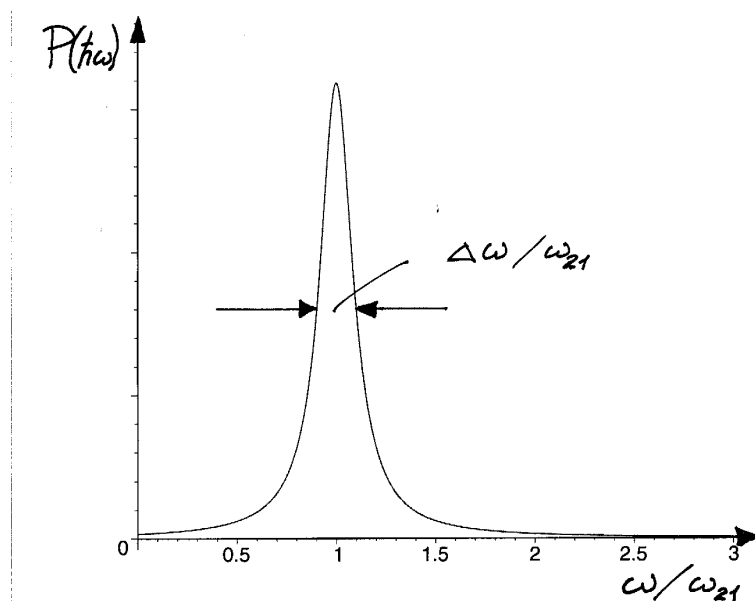
I *klassisk* strålingsteori følger det fra Maxwells ligninger at dersom en ladning gis en dempet oscillasjon med en frekvens ω_0 og en dempningstid τ , så vil også den utstrålte bølgen bli tilsvarende dempet. Ved å Fourier-analysere den utstrålte bølgen finner vi da at den har en frekvensfordeling med en topp ved ω_0 , og med en endelig bredde $\Delta\omega$ av størrelsesorden $1/\tau$. Denne bredden svarer til en endelig **linjebredde** $\Delta\lambda = \lambda\Delta\omega/\omega$.

Det viser seg at kvantemekanikken gir et lignende resultat for spontant emittert stråling. For den spontane overgangen $2p \rightarrow 1s$ i hydrogen, f.eks, er energi-bredden av de emitterte fotonene ⁵ $\hbar\Delta\omega = \hbar w_i$, hvor w_i er de-eksitasjonsraten. Mer presist kan det vises at energien til de emitterte fotonene er sannsynlighetsfordelt som

$$P(\hbar\omega) \propto \frac{1}{(\hbar\omega - \hbar\omega_{21})^2 + (\frac{1}{2}\hbar w_i)^2}. \quad (\text{T15.46})$$

Her er $w_i = w_{2 \rightarrow 1}^{\text{sp}} = 1/\tau_i$ den spontane raten for overgang fra (hvilken som helst av) de tre $2p$ -tilstandene til grunntilstanden. Denne sannsynlighetsfordelingen har såkalt **Lorentz-form**.

⁵Se f.eks avsnitt 11.5 i Bransden & Joachain, ellerr W. Heitler, *The Quantum Theory of Radiation* (3rd edition), Chap. V, §18 p 181..



Som illustrert i figuren, er halvverdibredden (“full vidde ved halvparten av maksimum”) av denne toppen $\Delta\omega = w_i$. Siden energi er en bevart størrelse, tolker vi dette slik at energien i begynnelsestilstanden ikke er skarp,⁶ men er sannsynlighetsfordelt med en bredde

$$\Delta E_2 = \hbar\Delta\omega = \hbar w_i = \hbar/\tau_i. \quad (\text{T15.47})$$

Det er nokså vanlig å kalle bredden ΔE_2 en *energi-usikkerhet* for $2p$ -nivået, og å kalle relasjonen

$$\Delta E \cdot \tau = \hbar$$

en uskarphetsrelasjon i energi og tid, men dette kan være litt misvisende.⁷

Vi merker oss at jo kortere levetiden for en eksitert tilstand er, desto større blir bredden i energi. Dette er svært viktig i partikkelfysikk, hvor de fleste “elementær”-partiklene har levetider av størrelsesorden 10^{-23} s, og dermed energibredder av størrelsesorden 100 MeV og masse-bredder på ~ 100 MeV/ c^2 , som kan utgjøre opp til 10 prosent av massen.

For eksiterte atomære nivåer blir de relative breddene små. I eksemplet diskutert ovenfor er f.eks den relative bredden

$$\frac{\Delta\omega}{\omega} = \frac{w_i}{\omega} \sim \frac{10^9 \text{ s}^{-1}}{10^{16} \text{ s}^{-1}} \approx 10^{-7}.$$

Den tilsvarende bredden $\Delta\lambda$ av bølgelengden kalles den **naturlige linjebredde**, og er i prinsippet målbar i atomære spektra. De observerte linjebreddene er imidlertid vesentlig større enn dette, fordi den totale linjebredde også får bidrag på grunn av kollisjoner og Doppler-forbredning.

⁶Merk at begynnelsestilstanden ψ_{2p} er en egentilstand til “partikkel-delen” \hat{H}_p av Hamilton-operatoren, men ikke til den totale Hamilton-operatoren \hat{H} . Dette er grunnen til at tilstanden ψ_{2p} ikke har skarp energi.

⁷Strengt tatt er ikke ΔE en ordinær usikkerhet, fordi rms-avviket for (T15.46) faktisk ikke eksisterer. (Prøv å regne det ut.) Dessuten er jo ikke tiden en observabel, bare en parameter.

Appendiks. Produktet av to sfæriske harmoniske

For å bevise (T15.43) betrakter vi to partikler 1 og 2, som er preparert i en tilstand med bandedreimpulser $\mathbf{L}_1^2 = \hbar^2 l_1(l_1 + 1)$ og $\mathbf{L}_2^2 = \hbar^2 l_2(l_2 + 1)$ ved en måling av disse observablene. Måler vi i tillegg L_{1z} og L_{2z} , etterlates systemet i en tilstand der vinkelavhengigheten beskrives av produkt-tilstander av typen

$$Y_{l_1 m_1}(\Omega_1) Y_{l_2 m_2}(\Omega_2) \quad (\text{der } \Omega_i \equiv \theta_i, \phi_i; i = 1, 2).$$

Slike tilstander kalte vi “gamle” i avsnittet om addisjon av dreieimpulser. Måler vi *deretter* kvadratet av den *totale* bandedreimpulsen, $\mathbf{J}^2 \equiv (\mathbf{L}_1 + \mathbf{L}_2)^2$, tvinger vi systemet inn i en egentilstand til operatorene $\hat{\mathbf{J}}^2$ og \hat{J}_z (i tillegg til $\hat{\mathbf{L}}_1^2$ og $\hat{\mathbf{L}}_2^2$). Denne “nye” tilstanden kan vi kalle $\Phi_{jm}(\Omega_1, \Omega_2)$:

$$\left\{ \begin{array}{c} \hat{\mathbf{J}}^2 \\ \hat{J}_z \end{array} \right\} \Phi_{jm}(\Omega_1, \Omega_2) = \left\{ \begin{array}{c} \hbar^2 j(j+1) \\ \hbar m \end{array} \right\} \Phi_{jm}(\Omega_1, \Omega_2). \quad (\text{T15.48})$$

Her er $m = m_1 + m_2$, siden J_z var skarp allerede etter den første målingen, mens kvantetallet j begrenses av trekant-ulikheten:

$$|l_1 - l_2| \leq j \leq l_1 + l_2.$$

Som vi har sett tidligere, kan de “nye” tilstandene utvikles i de “gamle”:

$$\Phi_{jm}(\Omega_1, \Omega_2) = \sum_{\substack{m_1 \\ (m_1 + m_2 = m)}} C_{jm; l_1 m_1 l_2 m_2} Y_{l_1 m_1}(\Omega_1) Y_{l_2 m_2}(\Omega_2). \quad (\text{T15.49})$$

Her er C -ene såkalte Clebsh-Gordan-koeffisienter. Omvendt kan de “gamle” utvikles i de “nye”:

$$Y_{l_1 m_1}(\Omega_1) Y_{l_2 m_2}(\Omega_2) = \sum_{\substack{j=|l_1-l_2| \\ (m=m_1+m_2)}}^{l_1+l_2} C'_{...} \Phi_{jm}(\Omega_1, \Omega_2). \quad (\text{T15.50})$$

Hold dere fast, for nå definerer vi en ny funksjon, $F_{jm}(\theta, \phi)$, ved

$$F_{jm}(\theta, \phi) \equiv F_{jm}(\Omega) = \{\Phi_{jm}(\Omega_1, \Omega_2)\}_{\Omega_1=\Omega_2=\Omega} = \sum_{\substack{m_1 \\ (m_1 + m_2 = m)}} C_{...} Y_{l_1 m_1}(\Omega) Y_{l_2 m_2}(\Omega). \quad (\text{T15.51})$$

(Vi setter altså $\theta_1 = \theta_2 = \theta$ og $\phi_1 = \phi_2 = \phi$.) Her er ϕ -avhengigheten (på høyresiden) $\exp[i(m_1 + m_2)\phi]$, så det følger trivielt at $F_{jm}(\Omega) \equiv F_{jm}(\theta, \phi)$ er en egenfunksjon til operatoren $\hat{L}_z \equiv (\hbar/i)\partial/\partial\phi$ med egenverdien $\hbar m = \hbar(m_1 + m_2)$. Men la oss vise dette med et litt mer tungvint argument: Ved å derivere hvert av produktene på høyresiden i (T15.51) med hensyn på ϕ finner vi at

$$\begin{aligned} \hat{L}_z F_{jm}(\Omega) &= \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \phi} F_{jm}(\theta, \phi) \\ &= \sum_{\substack{m_1 \\ (m_1 + m_2 = m)}} C_{...} \left(\left[\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \phi} Y_{l_1 m_1}(\Omega) \right] Y_{l_2 m_2}(\Omega) + Y_{l_1 m_1}(\Omega) \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \phi} Y_{l_2 m_2}(\Omega) \right) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= \left\{ \sum_{\substack{m_1 \\ (m_1+m_2=m)}} C_{\dots} \left(\left[\widehat{L}_{1z} Y_{l_1 m_1}(\Omega_1) \right] Y_{l_2 m_2}(\Omega_2) + Y_{l_1 m_1}(\Omega_1) \widehat{L}_{2z} Y_{l_2 m_2}(\Omega_2) \right) \right\}_{\Omega_1=\Omega_2=\Omega} \\
&= \left\{ \underbrace{(\widehat{L}_{1z} + \widehat{L}_{2z})}_{\widehat{J}_z} \Phi_{jm}(\Omega_1, \Omega_2) \right\}_{\Omega_1=\Omega_2=\Omega} \stackrel{\text{(T15.48)}}{=} \{ \hbar m \Phi_{jm}(\Omega_1, \Omega_2) \}_{\Omega_1=\Omega_2=\Omega} \\
&= \hbar m F_{jm}(\Omega).
\end{aligned}$$

Her er $\widehat{L}_{1z} = (\hbar/i)\partial/\partial\phi_1$ osv. I tillegg til \widehat{L}_z definerer vi også (på vanlig måte) operatorene

$$\widehat{L}_{\pm} = \widehat{L}_x \pm \widehat{L}_y = \frac{\hbar}{i} e^{\pm i\phi} \left(\pm i \frac{\partial}{\partial\theta} - \cot\theta \frac{\partial}{\partial\phi} \right).$$

Med samme logikk som ovenfor har vi da

$$\begin{aligned}
\widehat{L}_+ F_{jm}(\Omega) &= \sum_{\substack{m_1 \\ (m_1+m_2=m)}} C_{\dots} \left(\left[\widehat{L}_+ Y_{l_1 m_1}(\Omega) \right] Y_{l_2 m_2}(\Omega) + Y_{l_1 m_1}(\Omega) \widehat{L}_+ Y_{l_2 m_2}(\Omega) \right) \\
&= \left\{ \sum_{\substack{m_1 \\ (m_1+m_2=m)}} C_{\dots} \left(\left[\widehat{L}_{1+} Y_{l_1 m_1}(\Omega_1) \right] Y_{l_2 m_2}(\Omega_2) + Y_{l_1 m_1}(\Omega_1) \widehat{L}_{2+} Y_{l_2 m_2}(\Omega_2) \right) \right\}_{\Omega_1=\Omega_2=\Omega} \\
&= \{ \widehat{J}_+ \Phi_{jm}(\Omega_1, \Omega_2) \}_{\Omega_1=\Omega_2=\Omega} \\
&= \left\{ \hbar \sqrt{(j-m)(j+1+m)} \Phi_{j,m+1}(\Omega_1, \Omega_2) \right\}_{\Omega_1=\Omega_2=\Omega} \\
&= \hbar \sqrt{(j-m)(j+1+m)} F_{j,m+1}(\Omega).
\end{aligned}$$

Her har vi brukt stigeoperator-relasjonen for \widehat{J}_+ . Tilsvarende har vi at

$$\widehat{L}_- F_{j,m+1} = \hbar \sqrt{(j+m+1)(j+1-m-1)} F_{jm}(\Omega),$$

slik at

$$\widehat{L}_- \widehat{L}_+ F_{jm}(\Omega) = \hbar^2 (j-m)(j+1+m) F_{jm}(\Omega).$$

Med $\widehat{L}_z F_{jm}(\Omega) = \hbar m F_{jm}(\Omega)$ fra forrige side har vi da fra formelen $\widehat{\mathbf{L}}^2 = \widehat{L}_z^2 + \hbar \widehat{L}_z + \widehat{L}_- \widehat{L}_+$:

$$\widehat{\mathbf{L}}^2 F_{jm}(\Omega) = \hbar^2 [m^2 + m + (j-m)(j+1+m)] F_{jm}(\Omega) = \hbar^2 j(j+1) F_{jm}(\Omega).$$

$F_{jm}(\Omega)$ oppfyller altså de samme egenverdigningene som $Y_{lm}(\Omega)$ og må derfor være proporsjonal med denne:

$$F_{jm}(\Omega) = \Phi_{jm}(\Omega, \Omega) \propto Y_{lm}(\Omega).$$

Fra (T15.50) har vi da at

$$Y_{l_1 m_1}(\Omega) Y_{l_2 m_2}(\Omega) = \sum_{\substack{j=|l_1-l_2| \\ (m=m_1+m_2)}}^{l_1+l_2} C''_{\dots} Y_{jm}(\Omega). \quad \text{(T15.52)}$$

For at høyresiden skal ha samme paritet som venstresiden, $(-1)^{l_1+l_2}$, må bidragene fra $j = l_1 + l_2 - 1$, $j = l_1 + l_2 - 3$, osv være lik null. Summen over j i formelen ovenfor går altså i skritt på 2. I (T15.43), hvor $l_1 = 1$ og $l_2 = l$, får vi da bare de to bidragene fra $j = l - 1$ og $j = l + 1$. Dermed er (T15.43) bevist.