Pr.1 (zbierka str.190 A4) Na lineárny harmonický oscilátor kmitajúci v smere osi x dopadá pulz elmag. žiarenia polarizovaného v smere osi x. Intenzita elektrického poľa pulzu je

$$E_x(t) = e^{-(t/\tau)^2} E_0 \cos \omega t. \tag{1}$$

Nájdite v prvom ráde poruchovej teórie amplitúdu pravdepodobnosti pre prechod oscilátora zo základného do prvého excitovaného stavu.

Pomôcka

$$\int \psi_1^*(x) x \psi_0(x) dx = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega_0}} \tag{2}$$

Pr.2 Uvažujme dvojhladinovú sústavu. Stavy ψ_a a ψ_b sú stavy s ostrou hodnotou Hamiltoniánu $H_0(E_a < E_b)$. Majme časticu v stave ψ_a. V čase $t = 0$ ožiarime tento systém monochromatickou elektromagnetickou vlnou polarizovanou v smere osi z. Nájdite pravdepodobnosť prechodu častice do stavu ψ_b v čase t v prvom ráde poruchovej teórie.

Riešenie: Vplyv magnetického poľa možno v prvom priblížení zanedbať (pozri ZU kap.9.4), rovnako aj priestorovú závisloť vlnenia(dipólové priblíženie), ak je λ žiarenia omnoho väčšia ako typický rozmer atómov. Intenzitu elek. poľa môžeme potom zapísať ako

$$\vec{E} = E_0 \cos{(\omega t)} \vec{e}_z \tag{3}$$

Pre poruchový Hamiltonián a potrebný maticový element dostávame

$$H' = -qzE_0 \cos{(\omega t)} \Rightarrow H'_{ba} = -q \langle \psi_b | z | \psi_a \rangle E_0 \cos{(\omega t)} \equiv -d_z E_0 \cos{(\omega t)} \tag{4}$$

Ďalej po výpočte ľahkého integrálu predpokladajme, že $\omega_{ba} + \omega \gg |\omega_{ba} - \omega|$. Dostaneme:

$$P_{a\to b}(t) = |a_b(t)|^2 = \left(\frac{|d_z| E_0}{\hbar} \right)^2 \frac{\sin^2{[(\omega_{ba} - \omega)t/2)]}}{(\omega_{ba} - \omega)^2} \tag{5}$$

Pr.3(Obdoba Pr.2) Uvažujme dvojhladinovú sústavu. Stavy ψ_a a ψ_b sú stavy s ostrou hodnotou Hamiltoniánu $H_0(E_a < E_b)$. Majme časticu v stave ψ_b. V čase $t = 0$ ožiarime tento systém monochromatickou elektromagnetickou vlnou polarizovanou v smere osi z. Nájdite pravdepodobnosť prechodu častice do stavu ψ_a v čase t v prvom ráde poruchovej teórie. (Stimulovaná emisia)

Výsledok $P_{b\to a}(t) = |a_a(t)|^2 = \left(\frac{|d_z| E_0}{\hbar} \right)^2 \frac{\sin^2{[(\omega_{ba} - \omega)t/2)]}}{(\omega_{ba} - \omega)^2}$

Pr.4(Rozšírenie Pr.2, na nemonochromatické žiarenie) Ukážte, že ak máme systém z Pr.2 v kontakte so žiarením polarizovaným v smere osi z so spektrálnou hustotou $\rho(\omega)$, modifikuje sa nám pravdepodobnosť prechodu na

$$P_{a\to b}(t) = \frac{\pi |d_z|^2}{\epsilon_0 \hbar^2} \rho(\omega_{ba}) t \tag{6}$$

a pre pravdepodobnosť prechodu za jednotku času dostávame

$$R_{a\to b} = \frac{\pi |d_z|^2}{\epsilon_0 \hbar^2} \rho(\omega_{ba}) \tag{7}$$

Riešenie: Hustota energie monochromatickej elmag. vlny je rovná

$$\rho = \frac{\epsilon_0}{2} E^2 + \frac{1}{2\mu_0} B^2 = \frac{\epsilon_0}{2} E^2 + \frac{1}{2\mu_0 c^2} E^2 = \epsilon_0 E^2 = \epsilon_0 E_0^2 \cos^2{(\omega t)} \tag{8}$$

Ak uvážime, že stredná hodnota pre jeden cyklus je $\langle \cos^2{(\omega t)} \rangle = 1/2$, potom máme $\rho = \epsilon_0 / 2 E_0^2$. Výsledok z Pr.2 možeme napísať ako

$$P_{a\to b}(t) = \frac{2\rho |d_z|^2}{\epsilon_0 \hbar^2} \frac{\sin^2{[(\omega_{ba} - \omega)t/2)]}}{(\omega_{ba} - \omega)^2} \tag{9}$$

Zovšeobecnime $\rho \to \rho(\omega) d\omega$ a preintegrujme cez všetky frekvencie

$$P_{a\to b}(t) = \frac{2|d_z|^2}{\epsilon_0 \hbar^2} \int_0^\infty \rho(\omega) \frac{\sin^2{[(\omega_{ba} - \omega)t/2)]}}{(\omega_{ba} - \omega)^2} d\omega \approx \frac{2|d_z|^2}{\epsilon_0 \hbar^2} \rho(\omega_{ba}) \int_0^\infty \frac{\sin^2{[(\omega_{ba} - \omega)t/2)]}}{(\omega_{ba} - \omega)^2} d\omega \tag{10}$$

Substitúcia $x = (\omega_{ab} - \omega)t/2, \quad dx = -td\omega/2$ integračné hranice pôjdu od $\omega_{ba}t/2$ po $-\infty$. Vzhľadom na to, že podintegrálna funkcia je nenulová len pre malé hodnoty $|x|$ môžeme hranice rozšíriť na $\pm\infty$.

$$P_{a\to b}(t) = \frac{|d_z|^2}{\epsilon_0 \hbar^2} t\rho(\omega_{ba}) \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\sin^2 x}{x^2} dx = \frac{\pi |d_z|^2}{\epsilon_0 \hbar^2} \rho(\omega_{ba}) t \tag{11}$$

Pr.5(Rozšírenie Pr.4) Ukážte, že ak máme systém z Pr.4, v kontakte s nepolarizovaným žiarením prichádzajúcim zo všetkých smerov pre pravdepodobnosť prechodu za jednotku času dostávame

$$R_{a\to b} = \frac{\pi |\vec{d}|^2}{3\epsilon_0 \hbar^2} \rho(\omega_{ba}) \tag{12}$$

kde $\vec{d} = q \langle\psi_a|\, \vec{r}\, |\psi_b\rangle$ je maticový element elektrického dipólového momentu.

Riešenie: Nahraďme $|d_z|^2$ v rovnici (7) všeobecnejším: $|d_Z|^2 \to |\hat{\vec{n}} \cdot \vec{d}|^2$ a ustrednime tento výraz cez všetky možné polarizácie a smery šírenia elmag. poľa. Najprv ustrednime cez polarizáciu, pri fixovanom smere šírenia vlny v smere osi z. Dostávame

$$\left\langle |\hat{\vec{n}} \cdot \vec{d}|^2 \right\rangle_P = \frac{1}{2}\left[|\hat{\vec{i}} \cdot \vec{d}|^2 + |\hat{\vec{j}} \cdot \vec{d}|^2\right] = \frac{1}{2}\left[|d_x|^2 + |d_y|^2\right] = \frac{1}{2}|\vec{d}|^2 \sin\theta^2 \tag{13}$$

kde θ je uhol medzi $\vec{d}$ a smerom šírenia vlny.

Teraz ustrednime cez všetky možné smery šírenia vlny

$$\left\langle \left\langle |\hat{\vec{n}} \cdot \vec{d}|^2 \right\rangle_P \right\rangle_S = \frac{1}{4\pi} \int \left(\frac{1}{2}|\vec{d}|^2 \sin\theta^2\right) \sin\theta d\theta d\phi = \frac{|\vec{d}|^2}{3}. \tag{14}$$

Pr.6 Einsteinove koeficienty. Majme nádobu atómov v tepelnej rovnováhe s elektromagnetickým žiarením. N_a atómov je v stave z nižšou energiou ψ_a a N_b atómov je v stave z vyššou energiou ψ_b. Označme koeficient spontánnej emisie (pravdepodobnosť prechodu atómu zo stavu a do stavu b za jednotku času) ako A. Pravdepodobnosť prechodu za jednotku času pre stimulovanú emisiu je úmerná hustote elektromagnetického poľa (viď. Pr.5). Označme ju ako $B_{ab}\rho(\omega_{ba})$. Rovnako môžeme označiť pravdepodobnosť prechodu za jednodku času pre stimulovanú absorbciu ako $B_{ba}\rho(\omega_{ba})$. Potom môžeme písať

$$\frac{dN_b}{dt} = -N_b A - N_b B_{ab}\rho(\omega_{ba}) + N_a B_{ba}\rho(\omega_{ba}) = 0 \tag{15}$$

Nájdite vzťahy medzi koeficientami A, B_{ab}, B_{ba}. A napíšte čomu sú rovné.

Riešenie: Zo štatistickej fyziky vieme, že pri tepelnej rovnováhe platí

$$\frac{N_a}{N_b} = \frac{e^{-E_a/kT}}{e^{-E_b/kT}} = e^{\hbar\omega_{ba}/kT} \tag{16}$$

Ďalej vieme, že hustota energie žiarenia v tepelnej rovnováhe(Planckov zákon) je

$$\rho(\omega) = \frac{\hbar}{\pi^2 c^3} \frac{\omega^3}{e^{\hbar\omega/kT} - 1} \tag{17}$$

Porovnaním vzťahov (15) a (17) dostávame

$$B_{ab} = B_{ba}, \qquad A = \frac{\omega_{ba}^3 \hbar}{\pi^2 c^3} B_{ba} \tag{18}$$

Z príkladu 5. dostávame priamo

$$B_{ba} = \frac{\pi}{3\epsilon_0 \hbar^2}|\vec{d}|^2, \qquad A = \frac{\omega_{ba}^3 |\vec{d}|^2}{3\pi\epsilon_0 \hbar c^3}\ . \tag{19}$$

Aplikácie predošlých výsledkov.

Pr.7 Vypočítajte dobu života excitovaných $n = 2$ stavov atómu vodíka.

Postup Treba počítať maticové elementy typu $\langle\psi_{100}|\,\vec{r}\,|\psi_{200}\rangle\,, \langle\psi_{100}|\,\vec{r}\,|\psi_{211}\rangle\,, \ldots$ dosadiť do A(vzťah (19))doba života je $\tau = \frac{1}{A}$.

Vlnové funkcie atómu vodíka sú

$$\psi_{100} = \frac{a^{-3/2}}{\sqrt{\pi}} e^{-r/a}, \quad \psi_{200} = \frac{a^{-3/2}}{4\sqrt{2\pi}} \left(2 - \frac{r}{a}\right) e^{-r/a} \quad \psi_{210} = \frac{a^{-3/2}}{4\sqrt{2\pi}} \left(\frac{r}{a}\right) e^{-r/2a} \cos\theta$$
$$\psi_{21\pm1} = \frac{a^{-3/2}}{8\sqrt{\pi}} \left(\frac{r}{a}\right) e^{-r/2a} \sin\theta e^{\pm i\phi} \tag{20}$$

Pomocný integrál

$$\int_0^\infty t^4 e^{-3t/2} dt = \frac{2^8}{3^4} \tag{21}$$

Pr.8 V dipólovom priblížení sa možu deexcitovať len stavy s nenulovým maticovým elementom $\langle\psi_a|\,\vec{r}\,|\psi_b\rangle$, konkrétne pre atóm vodíka $\langle n'l'm'|\,\vec{r}\,|nlm\rangle$. Neskôr si ukážeme(pomocou Wigner-Eckartovej vety), že tento maticový element je nenulový len pre také stavy, pre ktoré platí

$$\Delta l \equiv l' - l = \pm 1 \qquad \Delta m \equiv m' - m = \pm 1, 0. \tag{22}$$

Toto sú takzvané *výberové pravidlá*. Rozmyslite si, aké sú dovolené rozpady pre prvé štyri hladiny atómu vodíka.[1]

Pr.9 Elektrón v atóme vodíka je v stave ψ_{300}.
a)Akými kanálmi sa môže rozpadať do ψ_{100}?
b)Ak budeme mať N atómov v stave ψ_{300}, aké percento z nich sa bude rozpadať každým kanálom?
c)Aká je doba života takéhoto stavu?

Pomocné vzťahy

$$Y_{00}(\theta,\phi) = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}, \quad Y_{11}(\theta,\phi) = \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin\theta e^{i\phi}, \quad Y_{10}(\theta,\phi) = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos\theta,$$
$$\int_0^\infty R_{30} r^3 R_{21} dr = \sqrt{2}\frac{2^7 3^4}{5^6} a$$

[1]Stavy, ktoré sa v rámci dipólového pribíženia nemôžu rozpadať ako napríklad ψ_{200} sa nazývajú *metastabilné stavy.* Neznamená to však, že sa nemôžu rozpadať vôbec. Môžu sa rozpadať prostredníctvom vyšších - multipólových prechodov. Tieto procesy sú však pomalšie a preto sa nazývajú *zakázané.*