

Aufgabenblatt 12

12.1 Dipolauswahlregeln

Arbeiten Sie folgenden Auszug aus dem Buch von Max Wagner durch.

9 Absorption, Emission und Streuung von Licht

Die Wechselwirkung des Lichts mit Materie wird in konsistenter Weise im Rahmen der Quantenelektrodynamik behandelt. Gute Beschreibungen darüber findet man in dem klassischen Buch von Heitler [17], aber auch in vielen anderen Werken wie z.B. bei Louisell [35]. Diese Beschreibungsweise bringt durch die Einführung von Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren für das elektromagnetische Feld sogar konzeptionelle und rechnerische Vereinfachungen gegenüber der üblichen Beschreibung, wie sie in den konventionellen Lehrbüchern der Quantenmechanik zum regulären Rüstzeug jedes Physikers gehört. Eine besonders empfehlenswerte Darlegung in diesem Sinne befindet sich beispielsweise im Buch von Blochinzew [3].

Für die gruppentheoretische Argumentation benötigen wir jeweils die allgemeinen Endformeln des theoretischen Formalismus zur Beschreibung der Phänomene. Deshalb werden wir die Herleitung derselben nur kurz andeuten und im übrigen auf die Lehrbücher verweisen.

9.1 Dipolübergänge

Wir betrachten ein quantenmechanisches System, in dem ein Dipoloperator \vec{D} definiert ist, über den das zeitabhängige elektrische Feld $\vec{E}(t)$ an das System angekoppelt werden kann. Dann hat der Hamiltonoperator die Form

$$H = H_0 + W \quad (9.1)$$

$$H_0 \varphi_n^{(0)} = E_n^{(0)} \varphi_n^{(0)} \quad (9.2)$$

mit

$$W = -\vec{D} \cdot \vec{E}(t) \quad (9.3)$$

$$\vec{E}(t) = \vec{e} \cdot E(t) \quad (9.4)$$

wobei H_0 der intrinsische (d.h. ungestörte) Hamiltonoperator mit den ungestörten Eigenlösungen $\{\varphi_n^{(0)}, E_n^{(0)}\}$ ist. Wir definieren als Dipolmatrixelement

$$\vec{D}_{mn} = \langle \varphi_m^{(0)} | \vec{D} | \varphi_n^{(0)} \rangle \quad (9.5)$$

Dann ist die vom Lichtfeld $\vec{E}(t)$ induzierte Übergangswahrscheinlichkeit pro Zeiteinheit w_{mn} gegeben durch

$$w_{mn} = \frac{(2\pi)^2}{\hbar^2} |\vec{e} \cdot \vec{D}_{mn}|^2 \cdot |E(\omega)|_{\omega=\omega_m-\omega_n}^2 \quad (9.6)$$

wobei $E(\omega)$ die Fouriertransformierte von $E(t)$ bedeutet:

$$E(\omega) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dt E(t) e^{-i\omega t} \quad (9.7)$$

mit der Abkürzung

$$\omega_m = \frac{E_m^{(0)}}{\hbar} \quad (9.8)$$

Aus (9.6) erkennen wir, daß induzierte Übergänge (Absorption: $\omega_m > \omega_n$, Emission: $\omega_m < \omega_n$) stattfinden, wenn das nach (9.5) definierte Dipolmatrixelement \vec{D}_{mn} nicht verschwindet. Nun ist der Dipoloperator \vec{D} ein polarer Vektor, der sich wie der Ortsvektor \vec{r} transformiert, und dessen Komponenten sich (im Sinne der Anti-Wigner-Konvention, siehe Kapitel 8.5) wie die Ortsfunktionen x, y, z transformieren:

$$\{D_x, D_y, D_z\} \Leftrightarrow \{x, y, z\} \quad (9.9)$$

Seine Komponenten konstituieren also eine reduzible Darstellung der Gruppe

$$\Gamma^{(D)} \equiv \Gamma^{(\{x_i\})} \quad (9.10)$$

Da sowohl $\varphi_m^{(0)}$ ($\Leftrightarrow \varphi_{m\mu i}$, $i = 1, \dots, d_\mu$) und $\varphi_n^{(0)}$ ($\Leftrightarrow \varphi_{n\nu j}$, $j = 1, \dots, d_\nu$) respektive Basisfunktionen zu irreduziblen Darstellungen $\Gamma^{(\mu)}$ und $\Gamma^{(\nu)}$ darstellen, kann das Matrixelement

$$\langle \varphi_{m\mu i} | \vec{D} | \varphi_{n\nu j} \rangle \quad (9.11)$$

nur dann nicht verschwinden, wenn in der Produktdarstellung $\Gamma^{(D)} \times \Gamma^{(\nu)}$ die Darstellung $\Gamma^{(\mu)}$ enthalten ist. Dabei ist unter der Produktdarstellung $\Gamma^{(D)} \times \Gamma^{(\nu)}$ die reduzible Darstellung gemeint, die von den in $\vec{D}\varphi_{n\nu j}$ enthaltenen Funktionen gebildet wird.

Auswahlregel für Dipolübergänge

Der elektrische Anteil des Lichtfeldes induziert zwischen den Zuständen $E_m^{(0)}$ ($\Leftrightarrow E_{m\mu}$) und $E_n^{(0)}$ ($\Leftrightarrow E_{n\nu}$), deren Eigenfunktionen $\varphi_m^{(0)}$ ($\Leftrightarrow \varphi_{m\mu i}$) und $\varphi_n^{(0)}$ ($\Leftrightarrow \varphi_{n\nu j}$) respektive Basisfunktionen der irreduziblen Darstellungen $\Gamma^{(\mu)}$ und $\Gamma^{(\nu)}$ sind, nur dann einen Übergang, wenn in der Produktdarstellung $\Gamma^{(D)} \times \Gamma^{(\nu)}$ die irreduzible Darstellung $\Gamma^{(\mu)}$ enthalten ist, wobei $\Gamma^{(D)}$ durch die drei Funktionen x, y, z generiert wird.



Wasserstoffatom ($G = SO(3) = \mathbf{R} \times C_i$)

Es ist beim Wasserstoffatom

$$\vec{D} = -e\vec{r} \Leftrightarrow \{x, y, z\} \quad (9.12)$$

Nach der Charaktertafel für $SO(3) = \mathbf{R} \times C_i$ ist

$$\Gamma^{(D)} = \Gamma^{(x, y, z)} = D_1^{(-)} \quad (9.13)$$

und

$$\Gamma^{(s)} = D_0^{(+)}, \quad \Gamma^{(p)} = D_1^{(-)}, \quad \Gamma^{(d)} = D_2^{(+)}, \quad \text{etc.} \quad (9.14)$$

Das Produkt $\Gamma^{(D)} \times \Gamma^{(p)}$ enthält die Darstellung $D_0^{(+)}$, $\Gamma^{(D)} \times \Gamma^{(d)}$ jedoch nicht:

$$\Gamma^{(D)} \times \Gamma^{(p)} = D_0^{(+)} + D_1^{(+)} + D_2^{(+)} \quad (9.15)$$

$$\Gamma^{(D)} \times \Gamma^{(d)} = D_1^{(-)} + D_2^{(-)} + D_3^{(-)} \quad (9.16)$$

Die Dipolübergänge $s \leftrightarrow p$ sind daher erlaubt, $s \leftrightarrow d$ dagegen verboten. \diamond