Задание от 20 июля

Автор: Хоружий Кирилл
Соавтор: Примак Евгений

От: *27 июля 2021 г.*

1.3 Электродипольный переход 1s → 2p

Поместим атом водорода в поле $\boldsymbol{E}$ вида

$$\boldsymbol{E}(z,\,t) = E_0\boldsymbol{\sigma}_+ e^{-i\omega t + ikz} + \text{c. c.}, \qquad \boldsymbol{\sigma}_+ = -\frac{\boldsymbol{x}_0 + i\boldsymbol{y}_0}{\sqrt{2}}, \qquad \Rightarrow \qquad \boldsymbol{E}(z,t) = -\frac{E_0}{\sqrt{2}}\left(\boldsymbol{x}_0\cos(\omega t) + \boldsymbol{y}_0\sin(\omega t - kz)\right).$$

Гамильтониан, описывающий динамику тогда

$$\hat{H} = \frac{\hat{\boldsymbol{p}}^2}{2m} - \frac{e^2}{\hat{r}} - \hat{\boldsymbol{d}}\cdot\boldsymbol{E}(\hat{z},\,t) = H_0 + V(t),$$

где возмущение, зависящее от времени,

$$\hat{V}(t) = -\frac{eE_0}{\sqrt{2}}\left(\hat{\boldsymbol{x}}\cdot\boldsymbol{x}_0\cos(\omega t - kz) + \hat{\boldsymbol{x}}\cdot\boldsymbol{y}_0\sin(\omega t - kz)\right).$$

Сразу перейдём к рассмотрению электродипольного приближения и перейдём к сферическим координатам:

$$\hat{V}(t) = -\frac{eE_0}{\sqrt{2}}\left(\hat{\boldsymbol{x}}\cdot\boldsymbol{x}_0\cos(\omega t) + \hat{\boldsymbol{x}}\cdot\boldsymbol{y}_0\sin(\omega t)\right) = -\frac{eE_0}{\sqrt{2}}\left(r\sin\theta\cos\varphi\cos\omega t + r\sin\theta\sin\varphi\sin\omega t\right).$$

Систему полагаем при $t=0$ в состоянии $|i\rangle = |n=1, l=0, m=0\rangle$. Из нестационарной теории возмущений можем найти оценку (в первом приближении) для вероятности перехода в состояние $|n\rangle$:

$$c_n(t) = \frac{1}{i\hbar}\int_0^t e^{i(E_2-E_1)t/\hbar}\langle n|V|i\rangle\,dt.$$

Для состояний водорода знаем волновые функции, разложим их на сферический гармоники, и найдём матричные элементы $\hat{V}$:

$$\psi_{00} = \frac{1}{2\sqrt{\pi}}, \qquad \begin{aligned} \psi_{1,1} &= -\tfrac{1}{2}e^{i\varphi}\sqrt{\tfrac{3}{2\pi}}\sin\theta, \\ \psi_{1,1} &= \tfrac{1}{2}\sqrt{\tfrac{3}{\pi}}\cos\theta, \\ \psi_{1,-1} &= \tfrac{1}{2}e^{-i\varphi}\sqrt{\tfrac{3}{2\pi}}\sin\theta, \end{aligned} \qquad \Rightarrow \qquad \begin{aligned} \psi_{1,1}\hat{V}\psi_{00}^\dagger &= -\tfrac{1}{4\pi}\sqrt{\tfrac{3}{2}}e^{i\varphi}\cos(\varphi-\omega t)\sin^2(\theta). \\ \psi_{1,0}\hat{V}\psi_{00}^\dagger &= \tfrac{1}{4\pi}\sqrt{\tfrac{3}{4}}\cos(\varphi-\omega t)\sin(2\theta), \\ \psi_{1,-1}\hat{V}\psi_{00}^\dagger &= \tfrac{1}{4\pi}\sqrt{\tfrac{3}{2}}e^{-i\varphi}\cos(\varphi-\omega t)\sin^2(\theta). \end{aligned}$$

Осталось проинтегрировать, и получить

$$\begin{aligned} \langle\psi_{1,1}|\hat{V}|\psi_{00}\rangle &= -\tfrac{1}{8}\sqrt{\tfrac{3}{2}}\pi e^{i\omega t}, \\ \langle\psi_{1,0}|\hat{V}|\psi_{00}\rangle &= 0 \\ \langle\psi_{1,-1}|\hat{V}|\psi_{00}\rangle &= \tfrac{1}{8}\sqrt{\tfrac{3}{2}}\pi e^{-i\omega t}. \end{aligned}$$

Подставим это в выражение для $c_n(t)$, и получим

$$c_{|2,1,1\rangle}(t) = -\frac{\pi}{8}\sqrt{\frac{3}{4}}\frac{eEf_r}{\Delta E + \omega\hbar}\left(1 - \exp\left(\frac{it(\Delta E + \omega\hbar)}{\hbar}\right)\right),$$

$$c_{|2,1,-1\rangle}(t) = \frac{\pi}{8}\sqrt{\frac{3}{4}}\frac{eEf_r}{\Delta E - \omega\hbar}\left(1 - \exp\left(\frac{it(\Delta E - \omega\hbar)}{\hbar}\right)\right)$$

где f_r возникает из интегрирования по r, – некоторая размерная констанста для этого перехода. Вероятности же перехода получаются равными

$$|c_{|2,1,1\rangle}(t)|^2 = \frac{3\pi^2}{64}\left(\frac{Eef_r}{\Delta E + \omega\hbar}\right)^2\sin^2\left(\frac{1}{2}\frac{\Delta E + \omega\hbar}{\hbar}t\right);$$

$$|c_{|2,1,-1\rangle}(t)|^2 = \frac{3\pi^2}{64}\left(\frac{Eef_r}{\Delta E - \omega\hbar}\right)^2\sin^2\left(\frac{1}{2}\frac{\Delta E - \omega\hbar}{\hbar}t\right).$$