

Andrzej Raczyński

Mechanika kwantowa cz. 4

0.1 Czas życia atomu w stanie wzbudzonym

Jeśli rozpatrywać atom opisany tylko przez hamiltonian atomowy H_{at} , tzn. jako układ izolowany, to jego stany stacjonarne są mają nieskończony czas życia. Lepszym przybliżeniem jest opisanie atomu w oddziaływaniu z polem promieniowania, nawet jeśli nie padają na atom żadne fotony. Opisany jest wtedy przez hamiltonian w przybliżeniu dipolowym z oddziaływaniem $e\mathbf{E}\mathbf{r}$

$$H = H_{at} + \sum_{\mathbf{k}\lambda} \hbar\omega [a_{\mathbf{k}\lambda}^\dagger a_{\mathbf{k}\lambda} + \frac{1}{2}] + \sum_{\mathbf{k}\lambda} [e\sqrt{\frac{\hbar}{2\epsilon_0\omega V}} (i\omega a_{\mathbf{k}\lambda} \mathbf{e}_{\mathbf{k}\lambda} \mathbf{r} + h.c.)], \quad (1)$$

gdzie "h.c." oznacza sprzężenie hermitowskie poprzedzającej części. Dwa pierwsze składniki tworzą hamiltonian niezaburzony H_0 . Stany, między którymi zachodzi przejście, to $|\psi_i\rangle|0\rangle$ czyli stan atomowy o wyższej energii i próżnia fotonowa oraz $|\psi_f\rangle|\mathbf{k}\lambda\rangle$, czyli stan atomowy o niższej energii i jeden foton o liczbach kwantowych $\mathbf{k}\lambda$. Stan początkowy nie jest stanem własnym pełnego hamiltonianu (lecz hamiltonianu H_0), nie jest więc stanem stacjonarnym i możliwe jest przejście do innego stanu. Element macierzowy opisujący przejście to

$$\langle\psi_f|\langle\mathbf{k}\lambda|\sum_{\mathbf{k}'\lambda'}\sqrt{\frac{\hbar}{2\epsilon_0\omega'V}}(-i\omega')a_{\mathbf{k}'\lambda'}^\dagger\mathbf{e}_{\mathbf{k}'\lambda'}^*\mathbf{e}_{\mathbf{k}\lambda}\mathbf{r}|0\rangle|\psi_i\rangle = -i\sqrt{\frac{\hbar\omega}{2\epsilon_0V}}e\langle\psi_f|\mathbf{e}_{\mathbf{k}\lambda}^*\mathbf{r}|\psi_i\rangle, \quad (2)$$

gdzie skorzystano z tego, że $\langle\mathbf{k}\lambda|a_{\mathbf{k}'\lambda'}^\dagger|0\rangle = \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}\delta_{\lambda\lambda'}$. Prawdopodobieństwo przejścia na jednostkę czasu wynosi więc

$$\frac{2\pi}{\hbar}\frac{\hbar e^2\omega}{2\epsilon_0V}|\langle\psi_f|\mathbf{e}_{\mathbf{k}\lambda}^*\mathbf{r}|\psi_i\rangle|^2\delta(E_f + \hbar\omega - E_i). \quad (3)$$

W doświadczeniu zbiera się sygnał z pewnego zbioru stanów końcowych; tu licza się fotony z pewnego przedziału energii i pewnego kąta bryłowego i o

pewnej polaryzacji. Gęstość stanów fotonowych obliczyć można następująco. Z reguł kwantyzacji wektora falowego $\mathbf{k} = \frac{2\pi}{l}(n_x, n_y, n_z)$ wynika, że jeden dozwolony wektor przypada na sześcian o objętości $(\frac{2\pi}{l})^3$ w przestrzeni wektorów falowych. W elementarnej objętości $d^3k = k^2 dk d\Omega = \frac{\omega^2 d\omega}{c^3} d\Omega$ znajduje się $\frac{\omega^2 d\omega}{c^3} d\Omega \frac{V}{(2\pi)^3}$ stanów i z taką wagą należy scałkować prawdopodobieństwo przejścia na jednostkę czasu. Delta Diraca wykona całkowanie, wyrzucając czynnik $\frac{1}{\hbar}$ oraz funkcję podcałkową o wartości częstości $\frac{E_i - E_f}{\hbar}$. Otrzymamy więc

$$\frac{2\pi \hbar \omega e^2}{\hbar} \frac{\omega^2}{2\epsilon_0 V \hbar c^3} \frac{V}{(2\pi)^3} d\Omega \sum_{\lambda} |\langle \psi_f | \mathbf{e}_{\mathbf{k}\lambda}^* \mathbf{r} | \psi_i \rangle|^2 \quad (4)$$

Sumę po polaryzacjach można wykonać, biorąc pod uwagę, że dowolny wektor \mathbf{b} można rozłożyć w bazie 3 protopadłych wektorów $e_{\mathbf{k}1}$, $e_{\mathbf{k}2}$ oraz $\frac{\mathbf{k}}{k}$

$$\mathbf{b} = (\mathbf{e}_{\mathbf{k}1}^* \mathbf{b}) \mathbf{e}_{\mathbf{k}1} + (\mathbf{e}_{\mathbf{k}2}^* \mathbf{b}) \mathbf{e}_{\mathbf{k}2} + (\mathbf{b} \frac{\mathbf{k}}{k}) \frac{\mathbf{k}}{k} \quad (5)$$

Czyli zachodzi

$$|\mathbf{b} \mathbf{e}_{\mathbf{k}1}|^2 + |\mathbf{b} \mathbf{e}_{\mathbf{k}2}|^2 = |\mathbf{b}|^2 - |\mathbf{b} \frac{\mathbf{k}}{k}|^2 \quad (6)$$

Stąd prawdopodobieństwo na jednostkę czasu emisji fotonu do kąta bryłowego $d\Omega$ wynosi

$$\frac{\omega^3 e^2}{8\pi^2 \epsilon_0 \hbar c^3} d\Omega [|\langle \psi_f | \mathbf{r} | \psi_i \rangle|^2 - |\langle \psi_f | \mathbf{r} | \psi_i \rangle \frac{\mathbf{k}}{k}|^2] \quad (7)$$

Jeśli do całkowania po kierunkach \mathbf{k} wybrać oś z równoległą do elementu macierzowego, otrzymamy

$$\frac{\omega^3 e^2}{8\pi^2 \epsilon_0 c^3} d\Omega [|\langle \psi_f | \mathbf{r} | \psi_i \rangle|^2 (1 - \cos^2 \theta) \sin \theta d\theta d\phi, \quad (8)$$

a całkowite prawdopodobieństwo przejścia na jednostkę czasu wynosi

$$\Gamma = \frac{\omega^3 e^2}{3\pi \hbar \epsilon_0 c^3} |\langle \psi_f | \mathbf{r} | \psi_i \rangle|^2, \quad (9)$$

gdzie skorzystano z faktu, że całka $\int_0^{2\pi} d\phi \int_0^{\pi} \sin^3 \theta d\theta = \frac{8\pi}{3}$.

Jako przykład weźmy atom wodoru i przejście spontaniczne ze stanu o liczbach kwantowych $(nlm)=(210)$ do stanu podstawowego (100) . Odpowiednie funkcje falowe mają postać

$$\psi_f(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{\pi a_0^3}} \exp\left(-\frac{r}{a_0}\right), \quad (10)$$

$$\psi_i(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{a_0^3}} \frac{1}{2\sqrt{6}} \frac{r}{a_0} \exp\left(-\frac{r}{2a_0}\right) \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \theta,$$

gdzie a_0 jest promieniem Bohra. Element macierzowy \mathbf{r} z tymi funkcjami falowymi jest różny od zera tylko dla składowej z i wynosi

$$\int \psi_f r \cos \theta \psi_i r^2 dr \sin \theta d\theta d\phi = a_0 \frac{2^8}{3^5 \sqrt{2}}.$$

Wstawienie tej wartości daje prawdopodobieństwo emisji spontanicznej na jednostkę czasu $6.33 \cdot 10^8$ 1/s. Prawdopodobieństwo P obsadzenia stanu początkowego zmienia się zgodnie z równaniem

$$\frac{dP}{dt} = -\Gamma P, \quad (11)$$

a więc $P(t) = \exp(-\Gamma t)$. Średni czas życia w stanie wzbudzonym można obliczyć jako

$$\tau = \frac{\int_0^\infty t P(t) dt}{\int_0^\infty P(t) dt} = \frac{1}{\Gamma}. \quad (12)$$

Dla badanego przejścia w atomie wodoru $\tau = 1.58$ ns. Tyle samo wynosi dla stanów początkowych $(nlm) = (211)$ i $(21-1)$.

Czasy życia różnych stanów wzbudzonych w różnych atomach mogą być różnych rzędów wielkości. Jeśli stan może rozpadać się do różnych stanów końcowych, efektywny czas życia jest odwrotnością sumy odwrotności czasów życia dla poszczególnych przejść (dodają się prawdopodobieństwa, czyli odwrotności czasów życia). Jeśli przejście dipolowe z jakiegoś stanu jest niemożliwe, może zachodzić przejście kwadrupolowe elektryczne i dipolowe magnetyczne, ale są one o kilka rzędów wielkości mniej prawdopodobne. Ciekawostką stanowią stany, z których żadne przejście z emisją jednego fotonu nie jest możliwe, np. stan $2s$ w atomie wodoru (200) . Ten stan rozpada się z równoczesną emisją dwóch fotonów z czasem życia $\frac{1}{7}$ s, co wymaga opisu w drugim rzędzie rachunku zaburzeń.

0.2 Przesunięcie Lamba

Istotą efektu Lamba jest poprawka do energii stanu atomowego, wynikająca z oddziaływania z wirtualnymi fotonami, tzn. atom nie jest traktowany jako izolowany, lecz znajduje się w kąpeli fotonów wirtualnych, które ustawicznie emituje i absorbuje. Rozważamy hamiltonian postaci, tym razem w postaci zawierającej pęd

$$H = H_{at} + \sum_{\mathbf{k}\lambda} \hbar\omega [a_{\mathbf{k}\lambda}^\dagger a_{\mathbf{k}\lambda} + \frac{1}{2}] + \sum_{\mathbf{k}\lambda} \sqrt{\frac{\hbar}{2\epsilon_0\omega V}} \frac{e}{m} [a_{\mathbf{k}\lambda} \mathbf{e}_{\mathbf{k}\lambda} \mathbf{p} + h.c.]. \quad (13)$$

Należy obliczyć poprawkę do energii własnej stanu niezaburzonego $|\psi_m\rangle|0\rangle$, w którym atom jest w stanie ψ_m i nie ma fotonów. Poprawka do energii obliczona będzie w drugim rzędzie rachunku zaburzeń niezależnego od czasu. Ogólny wzór na taką poprawkę do energii stanu α ma postać

$$E_\alpha^{(2)} = \sum_{\beta \neq \alpha} \frac{|V_{\alpha\beta}|^2}{E_\alpha - E_\beta}, \quad (14)$$

gdzie sumowanie przebiega po wszystkich stanach układu niezaburzonego (z wyjątkiem stanu α). Stany pośrednie β będą w tym przypadku stanami $|\psi_s\rangle|\mathbf{k}\lambda\rangle$, w których atom jest w stanie ψ_s i jest jeden foton o liczbach kwantowych $\mathbf{k}\lambda$. Poprawka do energii przyjmie postać

$$E_m^{(2)} = \sum_s \sum_{\mathbf{k}\lambda} |\langle \psi_m | \langle 0 | \sum_{\mathbf{k}'\lambda'} \sqrt{\frac{\hbar}{2\epsilon_0\omega'V}} \frac{e}{m} a_{\mathbf{k}'\lambda'} \mathbf{e}_{\mathbf{k}'\lambda'} \mathbf{p} | \mathbf{k}\lambda \rangle | \psi_s \rangle|^2 \frac{1}{E_m - E_s - \hbar\omega} = \sum_s \sum_{\mathbf{k}\lambda} \frac{\hbar}{2\epsilon_0\omega V} \frac{e^2}{m^2} |\langle \psi_m | \mathbf{e}_{\mathbf{k}\lambda} \mathbf{p} | \psi_s \rangle|^2 \frac{1}{E_m - E_s - \hbar\omega}. \quad (15)$$

Suma po \mathbf{k} jest zamieniona na całkę po ω , suma po λ wykonywana jest jak w poprzednim przykładzie, dając wynik

$$E_m^{(2)} = \frac{e^2 \hbar}{6\pi^2 m^2 \epsilon_0 c^3} \sum_s \int_0^\infty |\langle \psi_m | \mathbf{p} | \psi_s \rangle|^2 \frac{\omega d\omega}{E_m - E_s - \hbar\omega}. \quad (16)$$

Całka powyższa jest rozbieżna i poprawka wydaje się nieskończona. Zasadniczym powodem jest to, że oddziaływanie z wirtualnymi fotonami wzięto pod uwagę dwukrotnie: nie istnieje elektron pozbawiony takiego oddziaływania, a jego masę wzięto z doświadczenia i w niej tkwi już to oddziaływanie.

Gdyby wykonać obliczenia analogiczne do powyższych dla elektronu swobodnego, trzeba by zamiast funkcji wodorowych wstawić rozwiązania swobodne $\psi_{\mathbf{p}} = \frac{1}{\sqrt{V}} \exp[\frac{i}{\hbar} \mathbf{p} \mathbf{r}]$, a zamiast energii E_m -energie swobodne $\frac{1}{2m} \mathbf{p}^2$. Ponieważ $\psi_{\mathbf{p}}$ są funkcjami własnymi p i są one ortonormalne, poprawka wynosi

$$E_{\mathbf{p}}^{(2)} = \frac{e^2 \hbar}{6\pi^2 m^2 \epsilon_0 c^3} \frac{\mathbf{p}^2}{-\hbar} \int_0^\infty d\omega \quad (17)$$

i też jest nieskończona. Zakładając, że hipotetyczny elektron nieubrany w pole fotonowe ma masę "gołą" m_{bare} , można napisać, rozumiejąc, jak dotąd, że masa obserwowana m jest masą ubraną, czyli tą wziętą z doświadczenia

$$\frac{\mathbf{p}^2}{2m} = \frac{\mathbf{p}^2}{2m_{bare}} - \frac{\mathbf{p}^2}{2} \frac{e^2 \hbar}{3\pi^2 m^2 \epsilon_0 c^3} \frac{1}{\hbar} \int_0^\infty d\omega, \quad (18)$$

lub

$$\frac{1}{m} = \frac{1}{m_{bare}} - \frac{e^2 \hbar}{3\pi^2 m^2 \epsilon_0 c^3} \frac{1}{\hbar} \int_0^\infty d\omega. \quad (19)$$

Zatem masa goła powinna być zerowa, a masa obserwowana wyraża się przez różnicę dwóch nieskończonych wielkości. Taka operacja nazywa się renormalizacją, w tym wypadku masy, i jest nieunikniona w kwantowej teorii pola.

Tak więc hamiltonian H_{at} powinien mieć postać

$$H_{at} = \frac{\mathbf{p}^2}{2m_{bare}} + U = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + U + \frac{\mathbf{p}^2}{2} \frac{e^2}{3\pi^2 m^2 \epsilon_0 c^3} \int_0^\infty d\omega \quad (20)$$

czyli do pełnego hamiltonianu z początku tego podrozdziału należy dodać ostatni składnik ostatniego wzoru. Poprawka do energii pochodząca od niego w pierwszym rzędzie rachunku zaburzeń ma postać

$$E_m^{(2)'} = \langle \psi_m | \frac{\mathbf{p}^2}{2} \frac{e^2}{3\pi^2 m^2 \epsilon_0 c^3} \int_0^\infty d\omega | \psi_m \rangle. \quad (21)$$

Zapisując $\langle \psi_m | \mathbf{p}^2 | \psi_m \rangle$ jako $\sum_s \langle \psi_m | \mathbf{p} | \psi_s \rangle \langle \psi_s | \mathbf{p} | \psi_m \rangle$ można całą poprawkę do energii zapisać jako

$$E_m^{(2)} + E_m^{(2)'} = \frac{e^2}{6\pi^2 m^2 \epsilon_0 c^3} \sum_s |\langle \psi_m | \mathbf{p} | \psi_s \rangle|^2 (E_m - E_s) \int \frac{d\omega}{E_n - E_s - \hbar\omega}. \quad (22)$$

Całka dalej jest rozbieżna, ale jest to rozbieżność tylko logarytmiczna. Nie powinny dawać istotnego wkładu częstości większe od tej odpowiadającej

masie spoczynkowej elektronu, tzn. $\frac{mc^2}{\hbar}$. Przyjmując taką granicę całkowania otrzymuje się

$$E_m^{(2)} + E_m^{(2)'} = \frac{e^2}{6\pi^2 m^2 \epsilon_0 c^3 \hbar} \sum_s |\langle \psi_m | \mathbf{p} | \psi_s \rangle|^2 (E_s - E_m) \log \frac{|E_n - E_s - mc^2|}{|E_n - E_s|}. \quad (23)$$

Wyrażenie powyższe można oszacować, robiąc następujące kroki:

1. pominięcie energii $E_n - E_s$ w liczniku pod logarytmem,
2. zastąpienie różnicy energii w mianowniku pod logarytmem przez wartość średnią tej różnicy,
3. skorzystanie z relacji dla podwójnych komutatorów

$$\langle \psi_m | [\mathbf{p}, [\mathbf{p}, H_{at}]] \psi_m \rangle = 2 \sum_s (E_m - E_s) |\langle \psi_m | \mathbf{p} | \psi_s \rangle|^2,$$

którą można udowodnić wstawiając operator jednostkowy między operatory w rozpisany podwójnym komutatorze,

4. skorzystanie z relacji

$$[\mathbf{p}, [\mathbf{p}, H_{at}]] = -\hbar^2 \frac{-e^2}{4\pi\epsilon_0} \nabla^2 \frac{1}{r} = \frac{e^2 \hbar^2}{4\pi\epsilon_0} (-4\pi) \delta(\mathbf{r}).$$

Ostateczna poprawka dla atomu wodoru ma postać

$$E_m^{(2)} + E_m^{(2)'} = \frac{e^2}{6\pi^2 \epsilon_0 m^2 c^3} \frac{1}{2} \log \frac{mc^2}{\langle |E_m - E_s| \rangle} \frac{\hbar^2 e^2}{4\pi\epsilon_0} 4\pi |\psi_m(0)|^2. \quad (24)$$

$\langle \rangle$ oznacza tu średnią. Poprawka jest więc istotna dla stanów z zerowym momentem pędu ($l=0$), tylko dla nich funkcja falowa nie znika w zerze. Najbardziej spektakularnym efektem jest rozsuniecie podpoziomów $2s_{\frac{1}{2}}$ i $2p_{\frac{1}{2}}$. Efekt struktury subtelnej przewiduje tu degenerację, bo przesunięcie subtelne zależy od liczby kwantowej j , ale nie od l . Oddziaływanie z wirtualnymi fotonami podnosi poziom $2s_{\frac{1}{2}}$ o $4.4 \mu\text{eV}$.

Oddziaływanie z wirtualnym pojedynczymi fotonami jest jednym z wielu, choć najprostszym efektem radiacyjnym. Istnieją też inne, np. oddziaływanie z wirtualną parą elektron-pozyton, emisją i absorpcją większej liczby fotonów.... Efekty te są badane w z wielką dokładnością metodami elektrodynamiki kwantowej.

0.3 Rozpraszanie światła

Elementarny akt rozpraszania światła polega na tym, że na atom w stanie ψ_i pada foton o liczbach kwantowych $\mathbf{k}\lambda$, a w wyniku rozproszenia atom zostaje w stanie ψ_f i opuszcza atom foton o liczbach kwantowych $\mathbf{k}'\lambda'$. Kierunki obu fotonów są różne (w praktyce najczęściej prostopadłe). Stan końcowy atomu może być tożsamy ze stanem początkowym (rozpraszanie Rayleigha) lub różny od niego (rozpraszanie Ramana). Proces wymaga więc anihilacji jednego fotonu i kreacji drugiego, jest więc w najprostszym przypadku opisany rachunkiem zaburzeń drugiego rzędu. Hamiltonian ma postać w przybliżeniu dipolowym (w wersji z natężeniem pola elektrycznego)

$$H = H_0 + V = H_{at} + \sum_{\mathbf{k}\lambda} \hbar\omega [a_{\mathbf{k}\lambda}^\dagger a_{\mathbf{k}\lambda} + \frac{1}{2}] + \sum_{\mathbf{k}\lambda} e \sqrt{\frac{\hbar}{2\epsilon_0\omega V}} (i\omega a_{\mathbf{k}\lambda} \mathbf{e}_{\mathbf{k}\lambda} \mathbf{r} + h.c.), \quad (25)$$

Prawdopodobieństwo przejścia na jednostkę czasu w drugim rzędzie rachunku zaburzeń zawiera sumę (po wszystkich stanach pośrednich) wyrazów opisujących przejście przez jeden pośredni. Startując ze stanu $|\psi_i\rangle|\mathbf{k}\lambda\rangle$ i kończąc w stanie $|\psi_f\rangle|\mathbf{k}'\lambda'\rangle$ należy przejść przez stan $|\psi_s\rangle|0\rangle$ lub $|\psi_s\rangle|\mathbf{k}\lambda\mathbf{k}'\lambda'\rangle$, $s \neq i, f$. W pierwszej grupie stanów mamy najpierw anihilację fotonu padającego, a potem kreację wychodzącego, a w drugiej grupie kolejność jest odwrotna. Prawdopodobieństwo przejścia na jednostkę czasu

$$\begin{aligned} & \frac{2\pi}{\hbar} \left| \sum_s \frac{\langle \psi_f | \langle \mathbf{k}'\lambda' | V | 0 \rangle | \psi_s \rangle \langle \psi_s | \langle 0 | V | \mathbf{k}\lambda \rangle | \psi_i \rangle}{E_i + \hbar\omega - E_s} + \right. \\ & \left. \sum_s \sum_{\mathbf{k}_1\lambda_1} \frac{\langle \psi_f | \langle \mathbf{k}'\lambda' | V | \mathbf{k}\lambda\mathbf{k}_1\lambda_1 \rangle | \psi_s \rangle \langle \psi_s | \langle \mathbf{k}\lambda\mathbf{k}_1\lambda_1 | V | \mathbf{k}\lambda \rangle | \psi_i \rangle}{E_i + \hbar\omega - E_s - \hbar\omega - \hbar\omega_1} \right|^2 \delta(E_f + \hbar\omega' - E_i - \hbar\omega). \end{aligned} \quad (26)$$

Wstawienie oddziaływania V do powyższego wzoru daje prawdopodobieństwo rozproszenia na jednostkę czasu

$$\begin{aligned} & \frac{2\pi \hbar^2 \omega \omega' e^2}{\hbar (2\epsilon_0 V)^2} \left| \sum_s \frac{\langle \psi_f | \mathbf{e}_{\mathbf{k}'\lambda'}^* \mathbf{r} | \psi_s \rangle \langle \psi_s | \mathbf{e}_{\mathbf{k}\lambda} \mathbf{r} | \psi_i \rangle}{E_i + \hbar\omega - E_s} + \right. \\ & \left. \sum_s \frac{\langle \psi_f | \mathbf{e}_{\mathbf{k}\lambda} \mathbf{r} | \psi_s \rangle \langle \psi_s | \mathbf{e}_{\mathbf{k}'\lambda'}^* \mathbf{r} | \psi_i \rangle}{E_i - \hbar\omega' - E_s} \right|^2 \delta(E_f + \hbar\omega' - E_i - \hbar\omega). \end{aligned} \quad (27)$$

Na przykład, gdyby foton padał z kierunku osi x i miał polaryzację wzdłuż osi z , a badano by rozproszenie w kierunku osi y fotonu z polaryzacją x

otrzymano by

$$\frac{2\pi}{\hbar} \frac{\hbar^2 \omega \omega'}{(2\epsilon_0 V)^2} \left| \sum_s \frac{\langle \psi_f | x | \psi_s \rangle \langle \psi_s | z | \psi_i \rangle}{E_i + \hbar\omega - E_s} + \sum_s \frac{\langle \psi_f | z | \psi_s \rangle \langle \psi_s | x | \psi_i \rangle}{E_i - \hbar\omega' - E_s} \right|^2 \delta(E_f + \hbar\omega' - E_i - \hbar\omega). \quad (28)$$

0.4 Modelowa fotojonizacja

Opis Einsteina efektu fotoelektrycznego zewnętrznego przewiduje skwantowanie energii fotonów, ale nie pozwala na ilościowe przewidywanie natężenia fotoelektronów ani kierunku ich fotoemisji. Można takie przewidywania uzyskać w pierwszym rzędzie rachunku zaburzeń, nawet biorąc klasyczne pole monochromatyczne. Niech hamiltonian ma postać

$$H = H_{at} + e\mathbf{E}_0 \mathbf{r} \cos(\omega t). \quad (29)$$

Prawdopodobieństwo fotojonizacji na jednostkę czasu można obliczyć według wzoru

$$\frac{2\pi}{\hbar} |\langle \psi_{\mathbf{p}} | e\mathbf{E}_0 \mathbf{r} | \psi_i \rangle|^2 \delta(E_{\mathbf{p}} - E_i - \hbar\omega), \quad (30)$$

gdzie ψ_i i $\psi_{\mathbf{p}}$ są wektorami własnymi hamiltonianu atomowego H_{at} do wartości własnych E_i i $E_{\mathbf{p}}$. Element macierzowy w powyższym równaniu trudno jest policzyć, gdyż nawet dla atomu wodoru funkcje własne widma ciągłego nie wyrażają się przez funkcje elementarne. Można zrobić przybliżenie, zastępując je przez rozwiązania swobodne $\frac{1}{\sqrt{V}} \exp(\frac{i}{\hbar} \mathbf{p} \mathbf{r})$, które nie "czują" potencjału kulombowskiego. Niech stan początkowy jest stanem podstawowym atomu wodoru. Wtedy całkowanie można wykonać

$$\begin{aligned} & \int_V \frac{1}{\sqrt{V}} \exp(-\frac{i}{\hbar} \mathbf{p} \mathbf{r}) \mathbf{r} \frac{1}{\sqrt{\pi a_0^3}} \exp(-\frac{r}{a_0}) d^3 r = \\ & \frac{1}{\sqrt{V}} \frac{1}{\sqrt{\pi a_0^3}} i\hbar \nabla_{\mathbf{p}} \int_0^\infty r^2 dr \int_0^\pi \sin\theta d\theta \int_0^{2\pi} d\phi \exp[-\frac{r}{a_0} - \frac{i}{\hbar} pr \cos\theta] = \\ & \frac{1}{\sqrt{V}} \frac{1}{\sqrt{\pi a_0^3}} i\hbar \nabla_{\mathbf{p}} 2\pi \int_0^\infty r^2 dr \exp(-\frac{r}{a_0}) \int_{-1}^1 \exp(-\frac{i}{\hbar} pr u) du = \\ & \frac{1}{\sqrt{V}} \frac{1}{\sqrt{\pi a_0^3}} i\hbar \nabla_{\mathbf{p}} 2\pi \frac{\hbar}{p} 2 \int_0^\infty r \exp(-\frac{r}{a_0}) \sin \frac{pr}{\hbar} = \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& \frac{1}{\sqrt{V}} \frac{1}{\sqrt{\pi a_0^3}} i\hbar \nabla_{\mathbf{p}} 2\pi \frac{\hbar}{p} 2(-\hbar) \frac{d}{dp} \Re \int_0^\infty \exp\left[\left(\frac{-1}{a_0} + \frac{i}{\hbar}p\right)r\right] dr = \\
& \frac{1}{\sqrt{V}} \frac{1}{\sqrt{\pi a_0^3}} i\hbar \nabla_{\mathbf{p}} 2\pi \frac{\hbar}{p} 2(-\hbar) \frac{d}{dp} \Re \frac{1}{\frac{1}{a_0} - \frac{i}{\hbar}p} = \\
& \frac{1}{\sqrt{V}} \frac{1}{\sqrt{\pi a_0^3}} (-4\pi i \hbar^3) \nabla_{\mathbf{p}} \frac{-2}{a_0 \hbar^2} \frac{1}{\left(\frac{1}{a_0^2} + \frac{p^2}{\hbar^2}\right)^2} = \\
& \frac{1}{\sqrt{V}} \frac{1}{\sqrt{\pi a_0^3}} \frac{-32\pi i}{\hbar a_0} \frac{\mathbf{p}}{\left(\frac{1}{a_0^2} + \frac{p^2}{\hbar^2}\right)^3}. \tag{31}
\end{aligned}$$

Prawdopodobieństwo jonizacji na jednostkę czasu wynosi

$$\frac{2\pi}{\hbar} \frac{1}{V\pi a_0^3} \frac{1024\pi^2 e^2}{\hbar^2 a_0^2} \frac{(\mathbf{E}_0 \mathbf{p})^2}{\left(\frac{1}{a_0^2} + \frac{p^2}{\hbar^2}\right)^6} \delta(E_{\mathbf{k}} - E_i - \hbar\omega). \tag{32}$$

Sumowanie po stanach końcowych wykonuje się według podobnej filozofii, jak dla emisji spontanicznej. Na jeden dozwolony wektor falowy w stanie końcowym przypada objętość $\frac{(2\pi)^3}{V}$ w przestrzeni wektorów falowych. Na objętość d^3k przypada $\frac{V}{(2\pi)^3} d^3k$ wektorów i z taką wagą należy scałkować prawdopodobieństwo na jednostkę czasu. Po zamianie zmiennych, pamiętając, że $E_{\mathbf{p}} = \frac{p^2}{2m}$ otrzymujemy wagę

$$\frac{V}{(2\pi)^3} d^3k = \frac{V}{(2\pi\hbar)^3} p^2 dp d\Omega = \frac{V}{(2\pi\hbar)^3} p m dE_{\mathbf{p}} d\Omega \tag{33}$$

Delta Diraca wykona całkowanie po energiach dając postać prawdopodobieństwa fotojonizacji na jednostkę czasu do kąta bryłowego $d\Omega$ wynosi

$$\frac{1}{V\pi a_0^3} \frac{2\pi}{\hbar} \frac{1024\pi^2 e^2}{\hbar^2 a_0^2} \frac{(\mathbf{E}_0 \mathbf{p})^2}{\left(\frac{1}{a_0^2} + \frac{p^2}{\hbar^2}\right)^6} \frac{V}{(2\pi\hbar)^3} p m d\Omega, \tag{34}$$

gdzie za energię końcową należy wstawić $E_i + \hbar\omega$. Objętość kwantyzacji V skraca się. Prawdopodobieństwo na jednostkę czasu proporcjonalne jest do kwadratu natężenia pola elektrycznego fali. Kierunek wyrzucenia fotoelektronu określony jest przez kwadrat kosinusa kąta między tym kierunkiem a kierunkiem wektora polaryzacji fali. Poniżej progu, tzn. dla $E_i + \hbar\omega < 0$ efektu nie ma (argument delty Diraca się nie zeruje).

Przybliżony opis stanu końcowego zawodzi dla małych energii fotoelektronu. Z wyprowadzonego wzoru wynika, że w pobliżu progu czyli dla małych energii prawdopodobieństwo zachowuje się jak $p^{\frac{3}{2}}$, podczas gdy w rzeczywistości zmierza ono do stałej. Gdyby hamiltonian napisać w wersji $\approx \mathbf{A}\mathbf{p}$, ścisły wynik powinien być taki sam, ale dla przybliżonych funkcji tak nie jest.

W bardzo silnych polach laserowych możliwe jest fotojonizacja z absorpcją wielu fotonów, co wymaga opisu w wyższych rzędach rachunku zaburzeń lub metod nieperturbacyjnych.

0.5 Efekt Aharonova-Bohma

Efekt Aharonova-Bohma z udziałem pola magnetycznego polega na modyfikacji obrazu interferencji fal cząstki naładowanej przez włączenie pola magnetycznego w obszarze, do którego cząstka nie wchodzi. Z jednej strony jest uznawany za dowód fizycznego sensu potencjałów (choć w fizyce klasycznej uważa się, że potencjały mają charakter pomocniczy, natomiast pomiarami podlegają natężenia i indukcje pola elektrycznego i magnetycznego). Z drugiej strony widzi się nim potwierdzenie nielokalności mechaniki kwantowej, tzn. faktu, że na zachowanie cząstki ma wpływ nie tylko to, co dzieje się w jej najbliższym sąsiedztwie, lecz także oddziaływania w odległych nawet obszarach.

Weźmy wiązkę elektronów obiegającą z dwóch stron nieskończenie długą zwojnicę, w której płynie prąd elektryczny. Wewnątrz zwojnicy powstaje pole magnetyczne o indukcji \mathbf{B} , natomiast na zewnątrz zwojnicy $\mathbf{B} = 0$. Potencjał wektorowy \mathbf{A} na zewnątrz zwojnicy nie jest równy zero - tam $\nabla \times \mathbf{A} = \mathbf{B} = 0$, tzn. pole \mathbf{A} jest potencjalne i można napisać $\mathbf{A} = \nabla\chi$, gdzie

$$\chi(\mathbf{r}) = \int_{\mathbf{r}_0}^{\mathbf{r}} \mathbf{A} d\mathbf{r}, \quad (35)$$

gdzie krzywą całkowania można zmieniać dowolnie, byle wszystkie krzywe przebiegały z tej samej strony zwojnicy.

Jeśli znane są rozwiązania dla elektronów biegnących z obu stron zwojnicy w nieobecności pola magnetycznego, tzn. rozwiązania równania

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi_j(\mathbf{r}, t) = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} \psi_j(\mathbf{r}, t) + U(\mathbf{r}) \psi_j(\mathbf{r}, t), \quad (36)$$

$j = 1, 2$, to w obecności tego pola równanie jest spełnione dla ψ'_j

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi'_j(\mathbf{r}, t) = \frac{[\mathbf{p} + e\mathbf{A}(\mathbf{r})]^2}{2m} \psi'_j(\mathbf{r}, t) + U(\mathbf{r}) \psi'_j(\mathbf{r}, t), \quad (37)$$

gdzie

$$\psi'_j(\mathbf{r}, t) = \psi_j(\mathbf{r}, t) \exp\left[-\frac{ie}{\hbar} \int_{\mathbf{r}_0, C_j}^{\mathbf{r}} \mathbf{A}(\mathbf{r}') d\mathbf{r}'\right] \quad (38)$$

Krzywa C_j biegnie z j -tej strony zwojnicy. Różnica faz między dwiema wiązkami wynosi więc

$$-\frac{e}{\hbar} \int_{\mathbf{r}_0, C_1}^{\mathbf{r}} \mathbf{A}(\mathbf{r}') d\mathbf{r}' + \frac{e}{\hbar} \int_{\mathbf{r}_0, C_2}^{\mathbf{r}} \mathbf{A}(\mathbf{r}') d\mathbf{r}' = -\frac{e}{\hbar} \oint \mathbf{A}(\mathbf{r}') d\mathbf{r}' = -\frac{e}{\hbar} \int_S \nabla \times \mathbf{A} d\mathbf{r}' = -\frac{e}{\hbar} \Phi_B, \quad (39)$$

gdzie Φ_B jest strumieniem indukcji \mathbf{B} przez przekrój zwojnicy. Zmieniając natężenie prądu płynącego przez zwojnicę można zatem przesuwać prążki interferencyjne, co zaobserwowano doświadczalnie.