

Anhang A

Dipoloperator im Ein-Elektron-Atom

In Abschnitt 4.2 werden die Wechselwirkungen zwischen Lichtfeld und Atom mit Hilfe des elektrischen Dipoloperators $\hat{\mathbf{d}}$ beschrieben. Der Erwartungswert des Dipolmoments ergibt sich dann zu (Gleichung (4.15))

$$\langle \hat{\mathbf{d}} \rangle = \text{Spur}(\hat{\mathbf{d}}\hat{\rho}) = \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n \mathbf{d}_{ij} \rho_{ji} \quad (\text{A.1})$$

wobei \mathbf{d}_{ij} die elektrischen Dipolmatrixelemente sind.

In diesem Kapitel soll gezeigt werden, wie die Dipolmatrixelemente in einem wasserstoffähnlichen Atom berechnet werden können. Ein wasserstoffähnliches Atom besteht aus einem Z -fach positiv geladenen Kern und einem negativ geladenen Elektron. Da es sich hierbei um ein Zweikörperproblem handelt, ist das System analytisch lösbar und es können die Wellenfunktionen zu den Energie- und Drehimpulseigenwerten angegeben werden.

Das Barium-Ion ist insofern wasserstoffähnlich, als das die 54 Rumpfelektronen abgeschlossene Schalen in Xenon-Konfiguration bilden und damit gemeinsam mit dem Atomkern einen kugelsymmetrischen, zweifach positiv geladenen Atomrumpf bilden, der bei den in dieser Arbeit betrachteten Übergängen nicht angeregt wird. Das Barium-Ion kann man also vereinfachen zu einem Zweikörper-System bestehend aus einem zweifach positiv geladenen Rumpf und einem einfach negativ geladenen Valenzelektron.

Abweichungen von dem Wasserstoffpotential ergeben sich dadurch, daß das Valenzelektron eine endliche Aufenthaltswahrscheinlichkeit im inneren des Rumpfs hat und dort einer stärkeren Ladung durch den Kern ausgesetzt ist. Da aber diese Korrekturen keinerlei Einfluß auf die Rotationssymmetrien haben, können sie nur die Beträge, nicht aber die Richtungen der berechneten Dipolmatrixelemente beeinflussen.

A.1 Wellenfunktionen

Die Wellenfunktion eines Ein-Elektron-Atoms läßt sich als ein Produkt einer radialen und einer sphärischen Komponente darstellen [Bra 83]:

$$\Psi(r, \theta, \phi) = R_{nl}(r)Y_{lm}(\theta, \phi) \quad (\text{A.2})$$

Die radiale Wellenfunktion ist definiert als:

$$R_{nl}(r) = N_{nl}e^{-\rho/2}\rho^l L_{n+l}^{2l+1}(\rho) \quad , \quad \rho = \frac{2Z}{na_\mu}r \quad (\text{A.3})$$

wobei $L_{n+l}^{2l+1}(\rho)$ die zugeordneten Laguerre-Polynome sind. Explizit sind sie definiert durch:

$$L_{n+l}^{2l+1}(\rho) = \sum_{k=0}^{n-l-1} (-1)^{k+1} \frac{((n+l)!)^2}{(n-l-1-k)!(2l+1+k)!k!} \rho^k \quad (\text{A.4})$$

Der Faktor N_{nl} ist ein Normierungsfaktor und hängt von den Quantenzahlen n und l , nicht aber vom Radius ab.

Die sphärischen Komponenten der Wellenfunktion Y_{lm} sind die Kugelflächenfunktionen:

$$Y_{lm}(\theta, \phi) = (-1)^m \left(\frac{(2l+1)(l-m)!}{4\pi(l+m)!} \right)^{\frac{1}{2}} P_l^m(\cos \theta) e^{im\phi} \quad , m \geq 0 \quad (\text{A.5})$$

$$Y_{l,-m}(\theta, \phi) = (-1)^m Y_{lm}^*(\theta, \phi)$$

mit den zugeordneten Legendre Polynomen $P_l^m(\omega)$.

A.2 Dipolmatrixelemente

Sind die Wellenfunktionen bekannt, so lassen sich die Dipolmatrixelemente in Ortsdarstellung durch das Integral

$$\mathbf{d}_{ij} = \iiint \Psi_i^*(\mathbf{r}) \mathbf{e}r \Psi_j(\mathbf{r}) d^3\mathbf{r} \quad (\text{A.6})$$

berechnen. In Kugelkoordinaten erhält man:

$$\mathbf{d}_{ij} = e \int_0^\infty \int_0^\pi \int_0^{2\pi} \Psi_i^*(r, \theta, \phi) \mathbf{r} \Psi_j(r, \theta, \phi) d\phi \sin(\theta) d\theta r^2 dr \quad (\text{A.7})$$

Der Ortsvektor ist hier definiert als

$$\mathbf{r} = (r \sin(\theta) \cos(\phi))\mathbf{x} + r \sin(\theta) \sin(\phi)\mathbf{y} + r \cos(\theta)\mathbf{z} \quad (\text{A.8})$$

wobei \mathbf{x} , \mathbf{y} und \mathbf{z} die kartesischen Einheitsvektoren sind.

Die Auswertung des Integrals (A.7) ergibt für einen Übergang, mit gleichen magnetischen Quantenzahlen m der Zustände i und j (π -Übergang) ein reelles Dipolmatrixelement in Richtung der \mathbf{z} -Achse:

$$\mathbf{d}_{ij} \propto \mathbf{z} \quad (\text{A.9})$$

Bei magnetischen Quantenzahlen, die sich um ± 1 unterscheiden (σ^\pm -Übergang) ergeben sich komplexe Dipolmatrixelemente der Form:

$$\mathbf{d}_{ij} \propto \mathbf{x} \pm i\mathbf{y} \quad (\text{A.10})$$

Für größere Unterschiede in den magnetischen Quantenzahlen verschwindet das Dipolmatrixelement. Übergänge zwischen solchen Zuständen sind dipolverboten. Sie treten mit geringerer Rate auf und sind mit magnetischen Momenten oder elektrischen Momenten höherer Ordnung verbunden.