14. Übungsblatt zur Vorlesung **SS 2017**
Theoretische Physik II **Prof. G. Hiller**
Abgabe: bis Donnerstag, den 20. Juli 2017 14:00 Uhr

Aufgabe 1: Zwei-Niveau-System im oszillierenden Feld **(5 Punkte)**
Viele physikalische Systeme lassen sich in erster Näherung als eine Ansammlung von einfachen Zwei-Niveau-Systemen modellieren, welche mit externen Feldern wechselwirken. Es wird in diesem Modell lediglich der Grundzustand $|g\rangle$ und ein angeregter Zustand $|e\rangle$ betrachtet. Ein Paradebeispiel für diese Beschreibung ist das zeitliche Verhalten eines Atom- oder Elektronen-Spins (mit den 2 Zuständen Up und Down) in einem zeitlich veränderlichen Magnetfeld. Aber auch die Wechselwirkung eines Lichtfeldes, das sich nahezu in Resonanz mit einem einzigen atomaren Übergang befindet, kann auf diese Weise beschrieben werden.
Gegeben sei der Hamilton-Operator eines Zwei-Niveau-Systems, welches unter dem Einfluss eines mit Kreisfrequenz ω zeitlich oszillierenden Feldes steht:

$$\hat{H} = \frac{\Delta E}{2}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} - V_0 \begin{pmatrix} 0 & e^{-i\omega t} \\ e^{i\omega t} & 0 \end{pmatrix}.$$

Hierbei bezeichnet ΔE die Energiedifferenz zwischen den beiden beteiligten Energieniveaus und V_0 die Stärke des anregenden Potentials.

Das System befinde sich zum Zeitpunkt $t = 0$ im Grundzustand $|\Psi(t = 0)\rangle = |g\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$.

(a) Stellen Sie die zeitabhängige Schrödingergleichung für den allgemeinen Zustand $|\Psi(t)\rangle = \begin{pmatrix} a_e(t) \\ a_g(t) \end{pmatrix}$ mit dem gegebenen Hamilton-Operator $\hat{H}$ auf.

(b) Bestimmen Sie die Dynamik $a_e(t)$. Gehen Sie hierfür wie folgt vor:

- Formen Sie ihr Ergebnis aus (a) in eine DGL 2. Ordnung um, die lediglich von $a_e(t)$, $\dot{a}_e(t)$ und $\ddot{a}_e(t)$ abhängt.

- Wählen Sie den Ansatz $a_e(t) = A\mathrm{e}^{\lambda t}$ und lösen Sie die DGL. Führen Sie für eine bessere Übersichtlichkeit folgende Ersetzung durch:

$$\alpha = \omega^2 + \frac{(\Delta E)^2}{\hbar^2} + \frac{4V_0^2}{\hbar^2} - \frac{2\omega\Delta E}{\hbar}$$

- Bestimmen Sie die beiden auftretenden Konstanten mit Hilfe der Ergebnisse aus Aufgabenteil (a) und der Bedingung, dass sich zum Zeitpunkt $t = 0$ das System nicht im angeregten Zustand befindet.

(c) Mit welcher Wahrscheinlichkeit $p_e(t) = a_e^*(t)a_e(t)$ findet man das Zwei-Niveau-System bei einer Messung zum Zeitpunkt t im angeregten Zustand $|e\rangle$ wieder?

Aufgabe 2: Auswahlregeln **(7 Punkte)**

Das Matrixelement $\langle\psi_f|\hat{\vec{x}}|\psi_i\rangle$ wird auch elektrischer Dipolübergang genannt, es entspricht der Kopplung eines Dipolmomentes an ein elektrisches Feld. Über die Auswahlregeln kann bestimmt werden, ob das Matrixelement $\langle\psi_f|\hat{\vec{x}}|\psi_i\rangle$ verschwindet oder nicht. Verschwindet das Matrixelement, so ist dieser Übergang verboten. Ziel dieser Aufgabe ist es, die Auswahlregeln am Beispiel Wasserstoff herzuleiten. Betrachtet wird eine Störung

$$V_1 \approx \frac{e}{m\omega c}\hat{\vec{p}}\cdot\vec{E}_0\sin(\omega t) \quad .$$

(a) Berechnen Sie zunächst

$$\left[\hat{x}^\alpha, \hat{p}^\beta\hat{p}^\beta\right], \tag{1}$$

um anschließend einen Zusammenhang zwischen $\hat{\vec{p}}$ und $\left[\hat{\vec{x}}, \hat{H}_0\right]$ zu folgern.

(b) Berechnen Sie nun die Übergangsamplitude

$$\langle\psi_f|V_1|\psi_i\rangle \tag{2}$$

in Abhängigkeit von $\langle\psi_f|\hat{\vec{x}}|\psi_i\rangle$. Verwenden Sie hierzu ihre bisherigen Ergebnisse und $\omega_{\text{fi}} = \frac{E_f - E_i}{\hbar}$.

(c) Folgern Sie aus der Parität $(-1)^l$ der Wasserstoffwellenfunktion und der Bedingung

$$M_{\text{fi}} = e\cdot\iiint_{-\infty}^{\infty}\psi_f^*(x,y,z)\hat{\vec{x}}\psi_i(x,y,z)\,dx\,dy\,dz \neq 0 \tag{3}$$

eine Auswahlregel für die Drehimpulsquantenzahl l.

(d) Bestimmen Sie nun die Auswahlregeln für die magnetische Quantenzahl m mithilfe von

$$(M_{\text{fi}})_z = e\cdot\int\psi_f^*\cdot z\cdot\psi_i\,dx\,dy\,dz \tag{4}$$

und der Ihnen bekannten Wellenfunktion

$$\psi_{nlm} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}R_{nl}(r)\theta_m^l(\Theta)e^{im\phi}. \tag{5}$$

Es wird nur $(M_{\text{fi}})_z$ betrachtet, da eine linear polarisierte Lichtwelle mit einem elektrischen Feldvektor $\vec{E} = \{0, 0, E_0\}$ gewählt wurde und somit für die Matrixelemente

$$(M_{\text{fi}})_x = (M_{\text{fi}})_y = 0 \tag{6}$$

gilt.

(e) Folgern Sie aus den Bedingungen für zirkular polarisiertes Licht

$$(M_{\text{fi}})_x + i(M_{\text{fi}})_y \neq 0 \tag{7}$$
$$(M_{\text{fi}})_x - i(M_{\text{fi}})_y \neq 0 \tag{8}$$

erneut Auswahlregeln.

Aufgabe 3: Gestörter hamonischer Oszillator **(3 Punkte)**

Gegeben sei der dimensionslose Hamilton-Operator

$$\hat{H} = -\frac{\partial^2}{\partial x^2} + x^2 + \lambda x^4 = \hat{H}_0 + \lambda \hat{V} \quad . \tag{9}$$

Berechnen Sie die Korrektur zur Grundzustandsenergie in erster Ordnung.
Hinweis: Drücken sie hierzu den Ortsoperator durch die Auf- und Absteige-Operatoren aus $x = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(a^\dagger + a\right)$.

Aufgabe 4: Wiederholungsfragen **(5 Punkte)**

(a) Wie lautet die Normierungsbedingung der Wellenfunktion und was besagt die Born'sche Interpretation?
(b) Was bedeutet es für eine physikalische Messung wenn zwei Operatoren kommutieren?
(c) Was sind die Eigenschaften von hermiteschen Operatoren. Warum werden physikalische Messgrößen durch sie beschrieben?
(d) Um was für eine Symmetrie handelt es sich bei der Parität?

Aufgabe 5: Atome im Grundzustand **(5 Bonus- Punkte)**

Im Grundzustand besetzen die Elektronen eines Atoms unter Berücksichtigung des Pauli-Prinzips die Zustände nach den Hundschen Regeln:

0. Abgeschlossene Schalen und Unterschalen tragen nicht zum Gesamtdrehimpuls bei.

1. Die Gesamtspinquantenzahl S nimmt den maximal möglichen Wert an. Dabei stehen möglichst viele Spins parallel.

2. Unter den Zuständen mit maximaler Gesamtspinquantenzahl S liegt derjenige mit maximaler Gesamtbahndrehimpulsquantenzahl L energetisch am tiefsten. Zustände mit höchstmöglichen m_l werden zuerst besetzt. Es gilt $L = \sum m_l$, wobei die Summe über die besetzten Zustände läuft.

3. Unter den Zuständen mit maximaler Gesamtspinquantenzahl S und maximaler Gesamtbahndrehimpulsquantenzahl L bildet bei weniger als halbgefüllten Schalen der Zustand mit $J = |L - S|$ (minimales J) den Grundzustand, sonst der Zustand mit $J = L + S$ (maximales J).

Leiten Sie die Quantenzahlen S, L, J für den Grundzustand der folgenden Atome her. Wie lautet jeweils die spektroskopische Notation $^{2S+1}\mathrm{L}_\mathrm{J}$?

(a) Wasserstoff: $_1$H, Silicium: $_{14}$Si
(b) Eisen: $_{26}$Fe, Nickel: $_{28}$Ni
(c) Terbium: $_{65}Tb^{3+}$

Webseite zur Vorlesung:
`http://people.het.physik.tu-dortmund.de/~ghiller/TH2-SS2017.html`