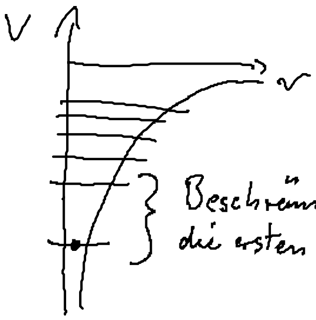
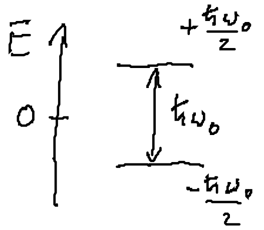
Zweiniveausysteme

- gebundene Zustände: Bsp: HO, H-Atom, Potenziale



- Anwendung:
  - Spin 1/2-Teilchen
  - Halbleiter-Bandstruktur
  - Moleküle

Schema:



$$\left.\begin{aligned} |1\rangle \qquad \hat{H}_0|1\rangle &= \frac{\hbar\omega_0}{2}|1\rangle \\ |0\rangle \qquad H_0|0\rangle &= -\frac{\hbar\omega_0}{2}|0\rangle \end{aligned}\right\} \Rightarrow \hat{H}_0 = \begin{pmatrix} -\frac{\hbar\omega_0}{2} & 0 \\ 0 & \frac{\hbar\omega_0}{2} \end{pmatrix}$$

Allgemein: Zustand $|\psi\rangle = c_0(t)|0\rangle + c_1(t)|1\rangle$

Normierung: $1 \stackrel{!}{=} |c_0|^2 + |c_1|^2$

Schrödingergleichung:

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\psi\rangle = \hat{H}_0|\psi\rangle$$

$$i\hbar\left(\dot{c}_0(t)|0\rangle + \dot{c}_1(t)|1\rangle\right) = -\frac{\hbar\omega_0}{2}c_0(t)|0\rangle + \frac{\hbar\omega_0}{2}c_1(t)|1\rangle$$

$$\rightarrow \quad c_0(t) = c_0(0)e^{i\frac{\omega_0}{2}t}$$

$$c_1(t) = c_1(0)e^{-i\frac{\omega_0}{2}t}$$

Messwahrscheinlichkeit

$$P(\text{Zustand } 0) = |\langle 0|\psi\rangle|^2 = |c_0(0)|^2 = \text{const.}$$

Zusätzlich: äußere Störung: el-magn Feld (Licht)

$$\hat{H} = \frac{(\hat{p} - q\underline{A}(\underline{r},t))^2}{2m} + q\cdot\underset{\substack{\uparrow \\ \text{el.-stat. Pot.}}}{\phi(\underline{r},t)} + V(\underline{r})$$

$\underline{A}$: sog. Vektorpotenzial, beschreibt Lorentzkraft

Aus $\underline{A}$ folgt das elektrische & magnetische Feld

$$\underline{E}(\underline{r},t) = -\underline{\nabla}\phi(\underline{r},t) - \frac{\partial}{\partial t}\underline{A}(\underline{r},t)$$

$$\underline{B}(\underline{r},t) = \underline{\nabla}\times\underline{A}(\underline{r},t)$$

Coulombeichung: wir können fordern, dass $\underline{\nabla}\cdot\underline{A} = 0$

$\rightsquigarrow$ Transversalwellen, z.B. linear pol. Lichtwellen

$$\Rightarrow \hat{H} = \frac{\hat{\underline{p}}^2}{2m} - \frac{q}{2m}\left(\hat{\underline{p}}\cdot\underline{A}(\underline{r},t) + \underline{A}(\underline{r},t)\cdot\hat{\underline{p}}\right) + \frac{q^2}{2m}\underline{A}^2(\underline{r},t) + q\phi(\underline{r},t) + V(\underline{r},t)$$

$$\underline{\nabla}\cdot A = 0 \Rightarrow [\hat{\underline{p}},\underline{A}] = \frac{\hbar}{i}[\underline{\nabla},\underline{A}] = 0$$

$$\Rightarrow \hat{\underline{p}}\cdot\underline{A} + \underline{A}\cdot\hat{\underline{p}} = 2\cdot\underline{A}\cdot\hat{\underline{p}}$$

$$\rightsquigarrow \hat{H} = \underbrace{-\frac{q}{m}\underline{A}\cdot\hat{\underline{p}} + \frac{q^2}{2m}A^2 + q\phi}_{=:\hat{H}_1\text{, Störoperator}} + \underbrace{\frac{\hat{\underline{p}}^2}{2m} + V(\underline{r},t)}_{\hat{H}_0}$$

NR: $[\underline{\nabla}\cdot\underline{A}]f(\underline{r})$

$$= \underline{\nabla}\cdot(\underline{A}\cdot f) - \underline{A}\cdot\nabla f$$

$$= \underbrace{(\underline{\nabla}\cdot\underline{A})}_{0} f + \underline{A}\cdot\underline{\nabla}f - \underline{A}\cdot\underline{\nabla}f$$

$$= 0$$

Annahmen: – keine freie Ladungen: $\phi = 0$, restliche Potenziale in $V(\underline{r},t)$

– im Folgenden: ebene Wellen

$$\underline{A}(\underline{r},t) = \tilde{\underline{A}}\cdot\cos(\underline{k}\cdot\underline{r} - \omega t)$$

ω: Lichtfrequenz

$$\rightarrow \underline{E} = -\frac{\partial}{\partial t}\underline{A} = \underbrace{-\tilde{\underline{A}}\omega}_{-\tilde{\underline{E}}\text{, E-Feldamplitude}}\cdot\sin(\underline{k}\cdot\underline{r} - \omega t)$$

Näherung:

– Ausdehnung R der Wellenfunktion klein im Vergleich zur Wellenlänge

$$\rightarrow \underline{k}\cdot\underline{r} \simeq 0 \Rightarrow \underline{E}(t) = -\tilde{\underline{E}}\sin\omega t$$

(Näherung geht schief für X-ray, γ-Strahlen)

– $|A| = \frac{|E|}{\omega}$ $\Rightarrow |A|^2$ sehr klein, vernachlässigbar.

ω – Licht: 10^{17} Hz

$$\Rightarrow \hat{H}_1 \approx -\frac{q}{m}\frac{\tilde{E}}{\omega}\cos(\omega t)\,\hat{p} \overset{\text{Elektron}}{=\!=} +\frac{e}{m}\frac{\tilde{E}}{\omega}\cos(\omega t)\,\hat{p}$$

Umschreiben:

$$[\hat{H}_0, \hat{\underline{r}}] = \frac{1}{2m}[\hat{\underline{p}}^2, \hat{\underline{r}}] = \frac{-i\hbar}{m}\hat{p} \Rightarrow \hat{\underline{p}} = \frac{im}{\hbar}\left(\hat{H}_0\cdot\hat{\underline{r}} - \hat{\underline{r}}\cdot\hat{H}_0\right)$$

$$\Rightarrow \hat{H}_1 = \frac{ie}{\hbar\omega}\,\underline{\tilde{E}}\cos(\omega t)\left(\hat{H}_0\hat{\underline{r}} - \hat{\underline{r}}\hat{H}_0\right)$$

- Wirkung von $\hat{H}_1$ auf den Zustand $|\psi\rangle$? $\Rightarrow$ Matrixelemente

$$\langle i|\hat{H}|j\rangle \equiv H_{ij}$$

$$H_{00}: \langle 0|\hat{H}|0\rangle = \langle 0|\hat{H}_0|0\rangle + \langle 0|\hat{H}_1|0\rangle$$

$$= -\frac{\hbar\omega_0}{2} + \frac{ie}{\hbar\omega}\tilde{E}\cos(\omega t)\underbrace{\langle 0|\underbrace{\hat{H}_0}_{\langle 0|-\frac{\hbar\omega_0}{2}}\hat{\underline{r}} - \hat{\underline{r}}\underbrace{\hat{H}_0|0\rangle}_{-\frac{\hbar\omega_0}{2}|0\rangle}}_{\to 0}$$

$$= -\frac{\hbar\omega_0}{2}$$

$\Rightarrow$ Energien werden vom Störoperator nicht beeinflusst.

$$H_{10}: \langle 1|\hat{H}|0\rangle = \underbrace{\langle 1|\hat{H}_0|0\rangle}_{\to 0} + \langle 1|\hat{H}_1|0\rangle$$

$$= \frac{ie}{\hbar\omega}\underline{\tilde{E}}\cos(\omega t)\,\langle 1|\hat{H}_0\hat{\underline{r}} - \hat{\underline{r}}\hat{H}_0|0\rangle$$

$$= i\frac{\omega_0}{\omega}\tilde{E}\cos(\omega t)\underbrace{\langle 1|e\hat{\underline{r}}|0\rangle}$$

$$= \int \varphi_1^*(\underline{r})\, e\cdot\underline{r}\,\varphi_0(\underline{r})\, d^3r$$

$\underline{\mu} := \langle 1|e\cdot\hat{\underline{r}}|0\rangle$ Dipolmatrixelement

Näherung: fast resonante Anregung $\omega \approx \omega_0$

$$\Rightarrow \hat{\underline{\underline{H}}} = \begin{pmatrix} -\frac{\hbar\omega_0}{2} & -i\underline{\mu}^*\cdot\underline{\tilde{E}}\cos\omega t \\ i\underline{\mu}\cdot\underline{\tilde{E}}\cos\omega t & \frac{\hbar\omega_0}{2} \end{pmatrix}$$

Zeitentwicklung:

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\psi\rangle = \hat{H}|\psi\rangle \qquad |\psi\rangle = c_0(t)|0\rangle + c_1(t)|1\rangle = \begin{pmatrix} c_0(t) \\ c_1(t) \end{pmatrix}$$

$$\Rightarrow \dot{c}_0(t) = i\frac{\omega_0}{2}c_0(t) - \frac{\underline{\mu}^*\cdot\underline{\tilde{E}}}{\hbar}\cos(\omega t)\, c_1(t)$$

$$\dot{c}_1(t) = -i\frac{\omega_0}{2}c_1(t) + \frac{\underline{\mu}\cdot\underline{\tilde{E}}}{\hbar}\cos(\omega t)\, c_0(t)$$

Ohne Störung würden sich c_0, c_1 wie folgt entwickeln:

$$c_i(t) = c_i(0)\, e^{\pm i\frac{\omega_0}{2}t}$$

Abspalten der ungestörten Zeitentwicklung

$$\tilde{c}_0(t) = c_0(t)\, e^{-\frac{i\omega_0}{2}t} \qquad |\tilde{c}_i|^2 = |c_i|^2$$

$$\tilde{c}_1(t) = c_1(t)\, e^{+\frac{i\omega_0}{2}t}$$

DGLs:

$$\dot{\tilde{c}}_0(t) = -\frac{\underline{\mu}^*\cdot\underline{\tilde{E}}}{\hbar}\cos(\omega t)\,\tilde{c}_1(t)\, e^{-i\omega_0 t}$$

$$\dot{\tilde{c}}_1(t) = +\frac{\underline{\mu}\cdot\underline{\tilde{E}}}{\hbar}\cos(\omega t)\,\tilde{c}_0(t)\, e^{+i\omega_0 t}$$

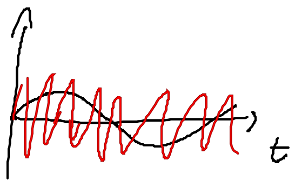
Fast resonante Anregung: $\omega \approx \omega_0$

$$\cos\omega t\, e^{\pm i\omega_0 t} = \frac{1}{2}\left(e^{i\omega t} + e^{-i\omega t}\right)e^{\pm i\omega_0 t}$$

$$= \frac{1}{2}\left(e^{i(\omega\pm\omega_0)t} + e^{-i(\omega\mp\omega_0)t}\right)$$

$|\omega-\omega_0| \approx 0$ langsame Oszillation

$|\underline{\omega+\omega_0}| \gg 1$ schnelle Oszillation, mittelt sich in der Zeit raus (rotating wave approximation, RWA)



Einsetzen:

$$\dot{\tilde{c}}_0(t) = -\frac{\mu^* \hat{E}}{2\hbar} e^{i(\omega_0-\omega)t}\, \tilde{c}_1(t)$$
$$\dot{\tilde{c}}_1(t) = +\frac{\mu \cdot \hat{E}}{2\hbar} e^{-i(\omega_0-\omega)t}\, \tilde{c}_0(t)$$

$$\ddot{\tilde{c}}_0(t) = i(\omega_0-\omega)\dot{\tilde{c}}_0 - \left|\frac{\mu \hat{E}}{2\hbar}\right|^2 \tilde{c}_0$$ Lösung: e-Ansatz

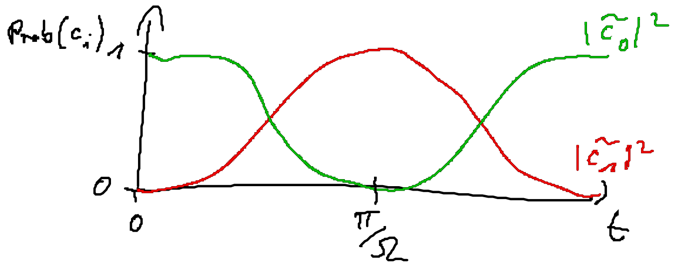
$$\tilde{c}_0(t) \sim e^{\lambda t}$$
$$\Rightarrow \lambda_\pm = \frac{i}{2}\left((\omega_0-\omega) \pm \sqrt{(\omega_0-\omega)^2 + 4\left|\frac{\mu \hat{E}}{2\hbar}\right|^2}\right)$$
$$\equiv \frac{i}{2}\left(\Delta \pm \sqrt{\Delta^2+\Omega^2}\right)$$

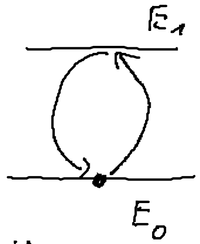
$\Delta := \omega_0 - \omega$, Frequenzverstimmung

$\Omega := \left|\frac{\mu \cdot \hat{E}}{\hbar}\right|$: Rabi-Frequenz

Zeitentwicklung des Systems, das bei $t=0$ $|\psi(t=0)\rangle = |0\rangle$

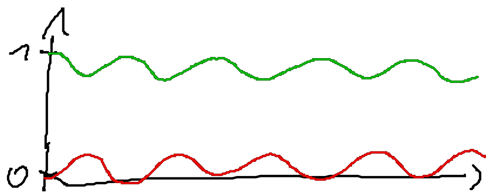
$\Delta = 0$:





reversible An- & Abregung
- Absorption
- stimulierte Emission

$\Delta \neq 0$:



Nichtresonante Anregung:
unvollständige Wechselwirkung.

- Anwendungen:
  - z.B.: Absorptionsspektren von Atomen
    - ⇒ Übergänge nur bei passenden Energien $\omega \approx \omega_0$
    - Stärke des Übergangs: Dipolmatrixelement $\underline{\mu}$
    - "verbotene" Übergänge: $|\underline{\mu}| \approx 0$