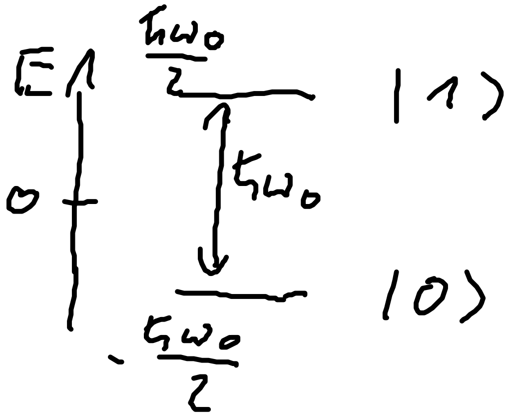
11. Zweiniveausysteme

- gebundene Zustände: Bsp. HO, H-Atom, Potentiale

⇝ Reduktion auf System mit zwei gebundenen Zuständen

- Anwendung: Spin 1/2, Näherung von komplexeren Systemen: Moleküle, Halbleiterbänder...



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

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

Normierung: $|c_0|^2 + |c_1|^2 = 1$

Schrödingergleichung:

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

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

$$\left.\begin{array}{ll}\Rightarrow & i\hbar\,\dot{c}_0(t) = -\frac{\hbar\omega_0}{2}c_0(t) \\ \text{analog} & i\hbar\,\dot{c}_1(t) = +\frac{\hbar\omega_0}{2}c_1(t)\end{array}\right\} \Rightarrow \begin{array}{l} c_0(t) = c_0(0)\cdot e^{i\frac{\omega_0}{2}t} \\ c_1(t) = c_1(0)\,e^{-i\frac{\omega_0}{2}t}\end{array}$$

Messwahrscheinlichkeit:

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

$\Rightarrow$ Zustand stationär

$\rightarrow$ Zusätzlich: äußere Störung: el.-magn. Feld (Licht)

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

$\underline{A}$: Vektorpotential

Aus $\underline{A}$ folgt elektrisches & Magnetfeld:

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

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

Eichfreiheit: $\underline{A}$ ist nicht eindeutig bestimmt $\Rightarrow$ Coulombeichung

$\underline{\nabla}\cdot\underline{A} = 0 \Rightarrow$ Transversalwellen (Strahlungseichung)

$$\Rightarrow \hat{H} = \frac{\hat{\underline{p}}^2}{2m} - \frac{q}{2m}\Big(\underbrace{\hat{\underline{p}}\,\underline{A}(\underline{r},t)}_{=\underline{A}\,\hat{\underline{p}}(\underline{r},t),\ \text{weil } [i\hbar\underline{\nabla},\underline{A}]=0} + \underline{A}(\underline{r},t)\,\hat{\underline{p}}\Big) + \frac{q^2}{2m}\underline{A}^2(\underline{r},t) + q\,\phi(\underline{r},t) + V(\underline{r},t)$$

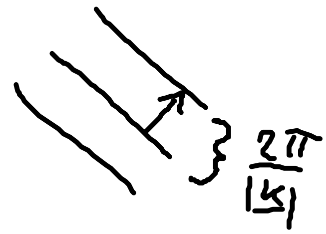
$$= \frac{\hat{\underline{p}}^2}{2m} \underbrace{- \frac{q}{m}\underline{A}\,\hat{\underline{p}} + \frac{q^2}{2m}\underline{A}^2 + q\,\phi}_{=:\ \hat{H}_1,\ \text{Störoperator}} + V(\underline{r},t)$$

Annahmen:

- keine freien Ladungen $\Rightarrow \phi(\underline{r},t)=0$; restlichen Potentiale $\hookrightarrow V(\underline{r},t)$

- Im Folgenden ebene Wellen:

$$\underline{A}(\underline{r},t) = \underset{\substack{\uparrow \\ \text{Amplitude}}}{\tilde{\underline{A}}} \cdot \cos(\underline{k}\cdot\underline{r} - \omega t)$$



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

Näherung:

Ausdehnung R der Wellenfkt. klein im Vergleich zur Wellenlänge

$$\Rightarrow R\cdot|\underline{k}| \approx 0 \Rightarrow \underline{r}\,\underline{k} \approx 0$$

(Dipolnäherung) Achtung: Funktioniert bei kleinen Wellenlängen nicht! (x-ray, γ)

$$\Rightarrow \underline{E}(t) = -\tilde{\underline{E}}\sin\omega t$$

$$|\tilde{A}| = \frac{|\tilde{E}|}{\omega}$$

$\omega \Leftarrow$ Licht: 10^{17}

$\Rightarrow |\hat{A}|$ klein $\Rightarrow |\tilde{A}|^2$ sehr klein

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

Umschreiben:

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

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

- Wirkung von $\hat{H}_1$ $\Rightarrow$ Matrixelemente

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

$$\frac{+\hbar\omega_0}{2} \quad |1\rangle$$
$$-\frac{\hbar\omega_0}{2} \quad |0\rangle$$

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

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

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

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

$\Rightarrow$ Energien werden vom Störoperator nicht beeinflusst.

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

$$= \frac{ie}{\hbar\omega}\underline{\hat{E}}\cos\omega t\ \underbrace{\langle 1|\hat{H}_0}_{\frac{\hbar\omega_0}{2}\langle 1|}\hat{\underline{r}} - \hat{\underline{r}}\underbrace{\hat{H}_0|0\rangle}_{\frac{-\hbar\omega_0}{2}|0\rangle}$$

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

NR: $\langle 1|H_0\hat{\underline{r}} - \hat{\underline{r}}H_0|0\rangle = \langle 1|H_0\hat{\underline{r}}|0\rangle - \langle 1|\hat{\underline{r}}H_0|0\rangle$

$$= \frac{\hbar\omega_0}{2}\langle 1|\hat{\underline{r}}|0\rangle - \frac{-\hbar\omega_0}{2}\langle 1|\hat{\underline{r}}|0\rangle$$

$$= \hbar\omega_0\underbrace{\langle 1|\hat{\underline{r}}|0\rangle}$$

$$\underline{\mu} := \langle 1 | e \cdot \underline{r} | 0 \rangle \mathrel{\hat{=}} \text{Dipolmatrixelement} \; = \int \varphi_1^*(\underline{r}) \, \underline{r} \, \varphi_0(\underline{r}) \, d^3r$$

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

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

Zeitentwicklung:

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

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

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

Ohne Störung entwickeln sich die Koeffizienten als

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

Abspalten der ungestörten Zeitentwicklung (Dirac-Bild)

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

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

DGLs:

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

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

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

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

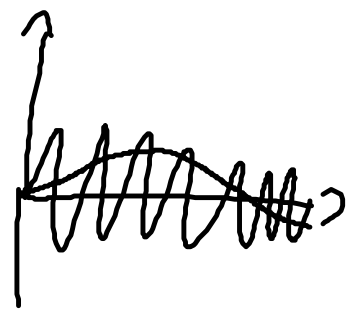
$\underline{|\omega - \omega_0|}$ klein $\rightarrow$ langsame Zeitabhängigkeit

$\underline{|\omega + \omega_0|}$ groß $\rightarrow$ sehr schnelle Oszillation

$\hookrightarrow$ $e^{\pm i(\omega+\omega_0)t}$ mittelt sich raus

$\hookrightarrow 0$

(Rotating wave approximation (RWA))



$$\Rightarrow \cos\omega t \, e^{\pm i\omega_0 t} \approx \frac{1}{2} e^{\pm i(\omega_0 - \omega)t}$$

Einsetzen:

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

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

$$\Rightarrow \ddot{\tilde{c}}_0 = i(\omega_0-\omega)\,\dot{\tilde{c}}_0 - \left|\frac{\mu\hat{E}}{2\hbar}\right|^2 \tilde{c}_0$$

Ansatz $\tilde{c}_0(t) \sim e^{\lambda t}$

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

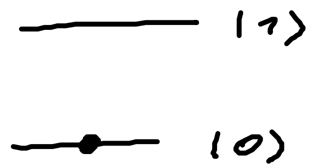
$$\tilde{c}_0(t) = c_+ e^{\lambda t} + c_- e^{-\lambda t}$$

$\Delta := \omega_0 - \omega$: Verstimmung, Detuning

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

Anfangsbedingungen:

Zweiniveausystem:



$\tilde{c}_0(0) = 1$

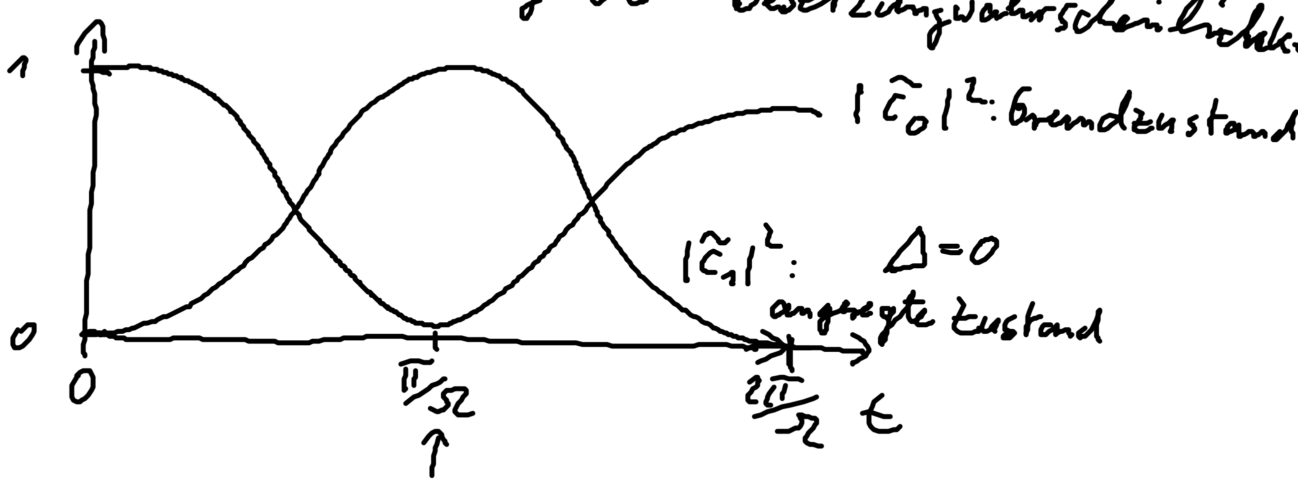
$\tilde{c}_1(0) = 0$

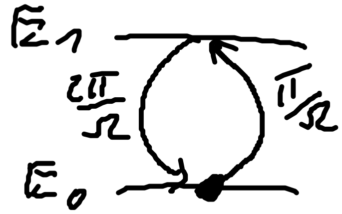
$\Rightarrow |\psi\rangle(t=0) = |0\rangle$

$$\Rightarrow \tilde{c}_0(t) = e^{\frac{i\Delta}{2}t}\left[\cos\left(\frac{1}{2}\sqrt{\Delta^2+\Omega^2}\,t\right) - i\frac{\Delta}{\sqrt{\Delta^2+\Omega^2}}\sin\left(\frac{1}{2}\sqrt{\Delta^2+\Omega^2}\,t\right)\right]$$

$$\tilde{c}_1(t) = e^{-\frac{i\Delta}{2}t}\frac{\Omega}{\sqrt{\Delta^2+\Omega^2}}\sin\left(\frac{1}{2}\sqrt{\Delta^2+\Omega^2}\,t\right)$$

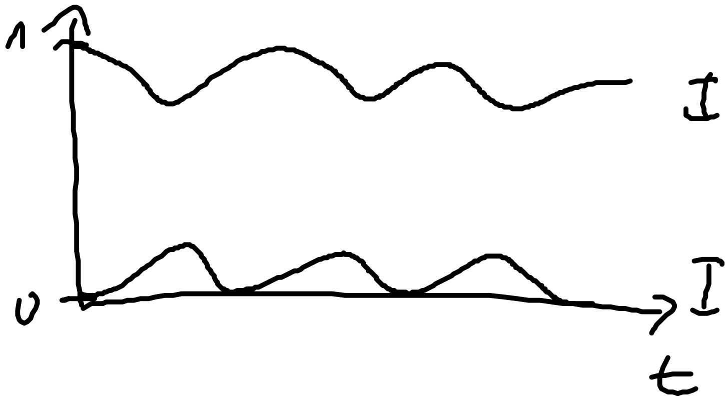
Zeitliche Entwicklung der Besetzungswahrscheinlichkeiten:





reversible An- & Abregung: Rabi-Oszillationen

$\Delta \neq 0$



Nichtresonante Anregung: teilweise Anregung des Systems.

An- & Abregung: Energieaustausch zwischen Materie und el.-magn. Feld
→ Absorption, stimulierte Emission

- Anwendung:
  Formalismus ist anwendbar z.B. auf Absorptionsspektren im Wasserstoffatom
  ⇒ Übergänge bei passenden Energien $|E_i - E_j|$
  Stärke des Übergangs aus den Dipolmatrixelementen
  $-\underline{\mu}_{ij} = 0$ ⇒ "verbotene" Dipolübergänge.
  $\langle i | e\underline{r} | j \rangle$