Technische Universität Berlin – Institut für Theoretische Physik

Prof. Dr. Andreas Knorr Dr. Marten Richter, Dr. Malte Selig, Maximilian Seyrich Robert Salzwedel, Philipp Stammer

3. Übungsblatt - Theoretische Physik II: Quantenmechanik

Abgabe: Mi. 08. Mai 2019 vor der Vorlesung im Hörsaal EW 202

Bei der Bepunktung wird Wert gelegt auf ausführliche Zwischenschritte und Kommentare zur Lösungsstrategie. Die Abgabe erfolgt in Dreiergruppen. Bitte geben Sie Ihre Namen, Matri-kelnummern und das Tutorium an! Elektronische, gedruckte oder kopierte Abgaben (Ausnahme Numerikaufgaben) sind nicht zugelassen.

Aufgabe 1 (20 Punkte): Zeitdynamik der Wellenfunktion unter externen Feldern: Rabioszillationen im Zwei-Zustands-System

In dieser Aufgabe wird ein Zwei-Zustands-System mit Ankopplung an ein externes zeitlich veränderliches elektrisches Feld diskutiert. Dazu sei zunächst der Hamilton Operator

$$H = \underbrace{-\frac{\hbar^2 \Delta}{2m} + V(\mathbf{r})}_{H_0} - e\mathbf{r} \cdot \mathbf{E}(t)$$
 (1)

gegeben. Dabei bezeichnet H_0 den Hamilton Operator des zeitunabhängigen Problems wobei $V(\mathbf{r})$ ein externes Potential für ein Elektron ist. Der dritte Term bezeichnet die Dipol-Kopplung des Elektrons an ein äußeres elektrisches Feld $\mathbf{E}(t) = \mathbf{E}_0(e^{i\omega_0 t} + e^{-i\omega_0 t})$. Ferner sei die Lösung des zeitunabhängigen Problems

$$H_0\varphi_n(\mathbf{r}) = \hbar\omega_n\varphi_n(\mathbf{r}) \tag{2}$$

bekannt, wobei $\hbar\omega_n$ die Eigenwerte und $\varphi_n(\mathbf{r})$ die Eigenzustände bezeichnen. Die Eigenzustände bilden ein vollständiges Orthonormalsystem.

(a) Entwickeln Sie für die Schrödinger Gleichung des Gesamtsystems $i\hbar\partial_t\Psi(\mathbf{r},t)=H\Psi(\mathbf{r},t)$ die Wellenfunktion nach den Lösungen des zeitunabhängigen Problems $\Psi(\mathbf{r},t)=\sum_n c_n(t)\varphi_n(\mathbf{r})$. Hier bezeichnen $c_n(t)$ die Entwicklungskoeffizienten. Zeigen Sie, dass die Entwicklungskoeffizienten c_n der Bewegungsgleichung

$$i\hbar\partial_t c_m(t) = \hbar\omega_m c_m(t) + \sum_{n\neq m} \mathbf{d}_{mn} \cdot \mathbf{E}(t)c_n(t)$$
 (3)

mit dem Dipolelement $\mathbf{d}_{mn} = -e \int_{\mathbb{R}^3} d^3r \varphi_m^*(\mathbf{r}) \mathbf{r} \varphi_n(\mathbf{r})$ genügen. Argumentieren Sie am Beispiel des Kastenpotentials (Übungsblatt 2), warum \mathbf{d}_{mn} nur für $m \neq n$ ungleich null ist, wenn der Koordinatenursprung in der Mitte des Kastens liegt.

(b) Reduzieren Sie das Problem auf ein Zwei-Zustands-System und schreiben Sie die entsprechenden Bewegungsgleichungen für $c_1(t)$ und $c_2(t)$ auf. Überführen Sie das Gleichungssystem in den sogenannten rotierten Rahmen, indem sie die Ersetzung $c_n(t) = \tilde{c}_n(t)e^{-i\omega_n t}$ vornehmen, und so die relevante und die schnell oszillierende (sich zu Null mittelnde) Zeitdynamik in den Bewegungsgleichungen trennen. **Rückseite beachten!**

Unter der Annahme resonanter Anregung $\omega_0 = \omega_2 - \omega_1$ lässt sich das Gleichungssystem dann schreiben als

$$i\hbar\partial_t \tilde{c}_1(t) = \mathbf{d}_{12} \cdot \mathbf{E}_0(1 + e^{-2i(\omega_2 - \omega_1)t})\tilde{c}_2(t), \tag{4}$$

$$i\hbar\partial_t \tilde{c}_2(t) = \mathbf{d}_{21} \cdot \mathbf{E}_0(e^{2i(\omega_2 - \omega_1)t} + 1)\tilde{c}_1(t). \tag{5}$$

Im folgenden dürfen die schnell oszillierenden Exponentialfaktoren vernachlässigt werden, was als Rotating Wave Approximation bezeichnet wird.

- (c) Lösen Sie das Gleichungssystem für $\tilde{c}_1(t)$ und $\tilde{c}_2(t)$ mit den Anfangsbedingungen $\tilde{c}_1(0)=1$ und $\tilde{c}_2(0)=0$. Berechnen Sie damit, wie sich $|c_1(t)|^2$ und $|c_2(t)|^2$ zeitlich entwickeln. Plotten (z.B. mit Mathematica oder gnuplot) und interpretieren Sie das Ergebnis physikalisch. Berechnen Sie explizit $\int d^3r |\Psi(\mathbf{r},t)|^2$ und interpretieren Sie das Ergebnis?
- (d) Berechnen und interpretieren Sie den Erwartungswert des Dipols

$$\mathbf{p} = e \int_{-\infty}^{\infty} dx \Psi^*(x, t) (x - \frac{L}{2}) \Psi(x, t)$$
 (6)

für die beiden untersten Zustände des Teilchens im unendlich hohen Kasten (Übungsblatt 2) und plotten Sie das Ergebnis (wählen Sie $\omega_2 - \omega_1 = 100 \frac{\Omega}{\hbar}$).