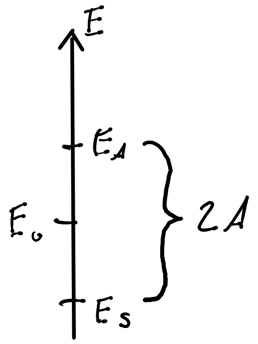
Blatt 6 Aufg II Basis → Hilbertbasis

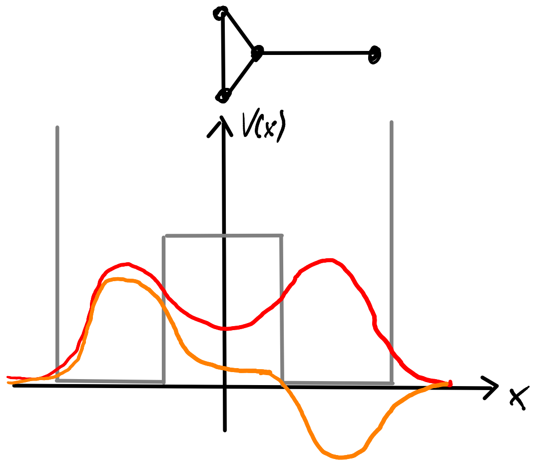
Erinnerung: Modell des Ammoniakmoleküls (NH_3)

niedrigste Eigenzustände mit Eigenenergien

$|\psi_S\rangle$ $E_S = \frac{(\hbar k_S)^2}{2m}$

$|\psi_A\rangle$ $E_A = \frac{(\hbar k_A)^2}{2m}$





Alle anderen Eigenzustände (auch des vollen Moleküls) liegen sehr viel höher in Energie.

$E_A - E_S =: 2A$, wobei A gegeben ist durch die Form des Potentials. Für das vereinfachte Kastenpotential $A \simeq \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2} \frac{4\, e^{-K\Delta}}{Ka}$ mit $K = \sqrt{2m(V_0 - E)}/\hbar$

$2A \sim 10^{-4}\,eV$ für NH_3 aus Experimenten

$E_1 - E_{S/A} \sim 0{,}12\,eV$

Bei einer Temperatur T ist das Verhältnis der Besetzungen der Energieniveaus E_i und E_j durch das Boltzmann-Gesetz gegeben:

$$\frac{N(E_j)}{N(E_i)} = e^{-(E_j - E_i)/k_B T} \qquad \ldots k_B \text{ Boltzmann-Konst.}$$

$T \sim 100K \qquad N(E_S)/N(E_A) \sim 1$

$$N(E_1)/N(E_{S/A}) \sim 10^{-6}$$

Das heißt bei einer Temperatur von $T \leq 100K$ sind vor allem die E_S und E_A besetzt. Daher können wir einen effektiven Hilbertraum mit 2 Energieniveaus zur Beschreibung von NH_3 benutzen

$|\psi_S\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ und $|\psi_A\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$ bilden eine Basis,

jeder beliebige Zustand läßt sich schreiben als

$$|\psi\rangle = \lambda|\psi_S\rangle + \mu|\psi_A\rangle = \begin{pmatrix} \lambda \\ \mu \end{pmatrix} \text{ mit } |\lambda|^2 + |\mu|^2 = 1$$

$\lambda, \mu \in \mathbb{C}$

Der Hamilton Operator in dieser Basis lässt sich schreiben als

$$\hat{H} = \begin{pmatrix} E_S & 0 \\ 0 & E_A \end{pmatrix} = E_S|\psi_S\rangle\langle\psi_S| + E_A|\psi_A\rangle\langle\psi_A|$$

Zeitentwicklung eines Zustands $|\psi\rangle$

$$i\hbar \frac{d}{dt}|\psi(t)\rangle = \hat{H}\,|\psi(t)\rangle$$

Sei: i) $|\psi(t=0)\rangle = |\psi_S\rangle \rightarrow \hat{H}|\psi_S\rangle = \begin{pmatrix} E_S & 0 \\ 0 & E_A \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = E_S \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$

$$\rightarrow |\psi(t)\rangle = e^{-iE_S t/\hbar}\,|\psi_S\rangle$$

stationärer Zustand

ii) $|\psi(t=0)\rangle = |\psi_A\rangle \rightarrow |\psi(t)\rangle = e^{-iE_A t/\hbar}\,|\psi_A\rangle$

$$|\psi(t=0)\rangle = \lambda|\psi_S\rangle + \mu|\psi_A\rangle$$

$$\rightarrow |\psi(t)\rangle = \lambda e^{-iE_S t/\hbar}|\psi_S\rangle + \mu e^{-iE_A t/\hbar}|\psi_A\rangle$$

$$= e^{-iE_S t/\hbar}\left(\lambda|\psi_S\rangle + \mu e^{-i(E_A - E_S)t/\hbar}|\psi_A\rangle\right)$$

nicht nur globale Phase
⇔ Zeitabhängige Phasendifferenz wird in den Messgrößen auftreten ⇔ kein stationärer Zustand

Was für Auswirkungen hat diese Zeitentwicklung auf physikalische Größen?
Wir können zum Beispiel die 'Position' von dem N-Atom messen.

$$|\psi_S\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|\psi_L\rangle + |\psi_R\rangle\right), \qquad |\psi_A\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|\psi_L\rangle - |\psi_R\rangle\right)$$

$|\psi_L\rangle$ hat eine starke Aufenthaltswahrscheinlichkeit im linken Topf, $|\psi_R\rangle$ im rechten.

$$\hat{X}|\psi_L\rangle = -|\psi_L\rangle \qquad \hat{X}|\psi_R\rangle = |\psi_R\rangle$$

d.h. in der Basis $|\psi_L\rangle, |\psi_R\rangle$:

$$\hat{X} = |\psi_R\rangle\langle\psi_R| - |\psi_L\rangle\langle\psi_L|$$

in der Basis $|\psi_{A,S}\rangle$: $\hat{X} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$

$$\langle X(t)\rangle = \langle\psi(t)|\hat{X}|\psi(t)\rangle = \lambda^*$$

$$= (\lambda^*(t)\,\mu^*(t)) \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \lambda(t) \\ \mu(t) \end{pmatrix}$$

$$= \lambda^*\mu\, e^{-i\omega_0 t} + \lambda\mu^* e^{i\omega_0 t}$$

mit $\hbar\omega_0 = 2A$.

für $\lambda = \mu = \frac{1}{\sqrt{2}}$

$$\langle X(t)\rangle = \cos\omega_0 t$$

Das N-Atom oszilliert zwischen dem rechten und linken Topf mit der Frequenz ω_0. Es 'tunnelt' zwischen den Töpfen und es heißt 'Inversion des Ammoniakmoleküls'

Experimentell findet man $\frac{\omega_0}{2\pi} \sim 24\,\text{GHz}$, $T \sim 4{,}2 \cdot 10^{-11}\,s$

Das Ammoniak Molekül in einem elektrischen Feld

Wir werden im Folgenden das Funktionsprinzip eines Masers (microwave amplification by stimulated emission of radiaton) innerhalb des entwickelten 2 Zustandsformalismus erklären.

Kopplung von NH_3 zu einem elektrischen Feld
N-Atom zieht Elektronen an $\leftrightarrow$ elektrisches Dipolmoment D

$$\hat{D} = d_0 \hat{X} \qquad \text{mit } d_0 \sim 3 \cdot 10^{-11}\, eV/(V/m)$$

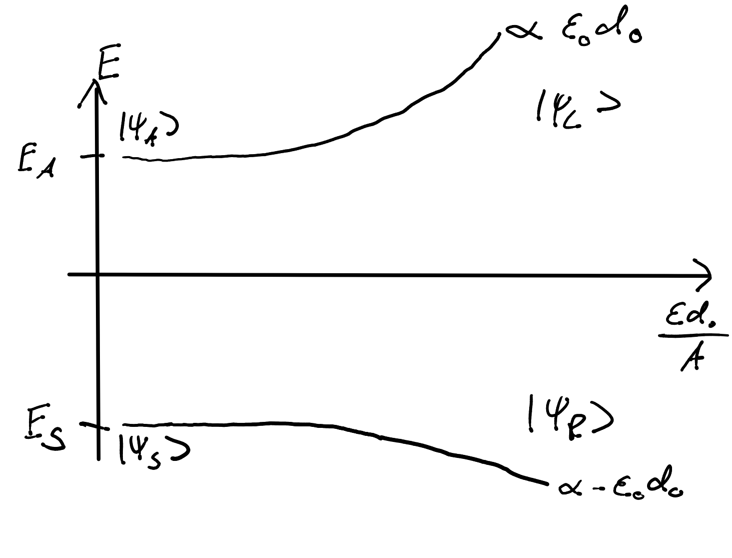
$$= \begin{pmatrix} 0 & d_0 \\ d_0 & 0 \end{pmatrix}$$

Potentielle Energie Observable: $\hat{W} = -\underset{\substack{\uparrow \\ \text{elektrisches Feld}}}{\varepsilon} \hat{D} = \begin{pmatrix} 0 & -\eta \\ -\eta & 0 \end{pmatrix}$

$\eta = \varepsilon \cdot d_0$

Gesamter Hamilton-Operator:

$$\hat{H} = \begin{pmatrix} E_0 - A & -\eta \\ -\eta & E_0 + A \end{pmatrix}$$



Eigenwerte

$$E_- = E_0 - \sqrt{A^2 + \eta^2} \qquad |\psi_-\rangle = \begin{pmatrix} \cos\vartheta \\ \sin\vartheta \end{pmatrix}$$

$$E_+ = E_0 + \sqrt{A^2 + \eta^2} \qquad |\psi_+\rangle = \begin{pmatrix} -\sin\vartheta \\ \cos\vartheta \end{pmatrix}$$

mit $\tan 2\vartheta = \eta/A \quad -\pi/4 < \vartheta < \pi/4$

kleines Feld $(\eta \ll A)$ $\quad E_\mp \simeq E_0 \mp \left(A + \frac{d_0^2 \varepsilon^2}{2A}\right)$

quadratischer Anstieg / Abfall in ε

$$|\psi_-\rangle \simeq |\psi_S\rangle + \frac{d_0\varepsilon}{2A}|\psi_A\rangle$$

$$|\psi_+\rangle \simeq |\psi_A\rangle - \frac{d_0\varepsilon}{2A}|\psi_S\rangle$$

und $\langle\psi_\mp|\hat{D}|\psi_\mp\rangle \simeq \pm \underbrace{\frac{d_0^2}{A}}_{\text{Polarisierbarkeit des Moleküls}} \varepsilon$

starkes Feld $(\eta \gg A)$ $\quad E_\pm \approx E_0 \pm \varepsilon d_0$

$$|\psi_-\rangle \approx |\psi_R\rangle$$

$$|\psi_+\rangle \approx -|\psi_L\rangle$$

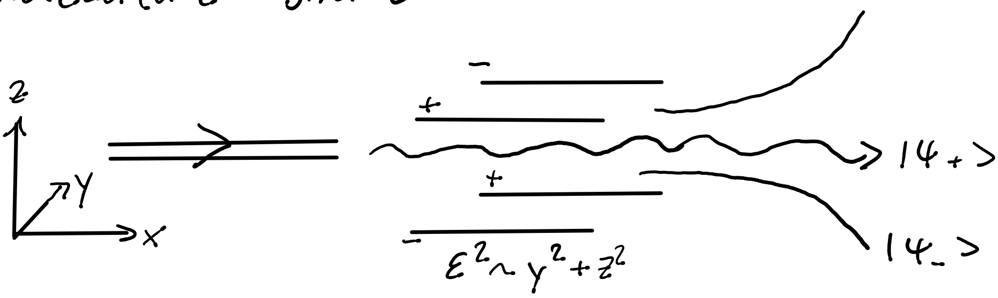
Näherung gilt nur solange $E_+ \ll E_1$

inhomogenes elektrisches Feld:

In einem schwachen Feld kann der Term $\pm \frac{d_0^2 \varepsilon^2}{2A}$ als ein Potential interpretiert werden, welches unterschiedliche Vorzeichen für den Zustand $|\Psi_-\rangle$ und $|\Psi_+\rangle$ hat.

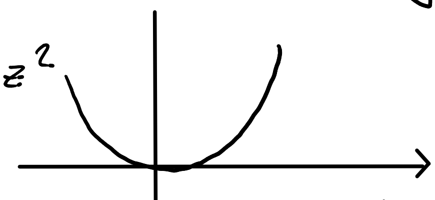
Eine Kraft $F_{\mp} = \pm \nabla\left(\frac{d_0^2 \varepsilon^2(\vec{r})}{2\pi}\right)$ wirkt, die vom Zustand abhängt

Molekularer Strahl

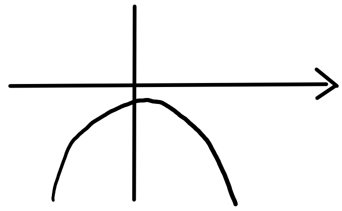


$|\Psi_+\rangle$ sehen harmonisches Potential in yz Ebene

$\propto \frac{d^2 \varepsilon^2}{2A} \propto y^2+z^2$



$|\Psi_-\rangle$ sehen $\propto -\frac{d^2 \varepsilon^2}{2A}$



Strahl der Moleküle wird separiert nur die $|\Psi_+\rangle \sim |\Psi_A\rangle$ 'angeregten' Moleküle bleiben fokussiert

<u>Populationsinversion</u>

Stimulierte Emission

Bei der stimulierten Emission zwingt man die Moleküle vom Zustand $|\psi_A\rangle \to |\psi_S\rangle$
Dabei verlieren sie die Energie $2A$, die sie als Photon ausstrahlen. Dieser Prozess passiert auch spontan, jedoch mit einer Lebensdauer von einem Monat.

Wir betrachten ein oszillierendes elektrisches Feld
$\mathcal{E} = \mathcal{E}_0 \cos(\omega t)$

$$\hat{H}(t) = \begin{pmatrix} E_0 - A & -\eta\cos(\omega t) \\ -\eta\cos(\omega t) & E_0 + A \end{pmatrix}$$ explizit Zeitabhängig
$\eta = \mathcal{E}_0 d_0$

Wollen die Schrödingergleichung lösen:

$$i\hbar \frac{d}{dt}|\psi(t)\rangle = \hat{H}(t)|\psi(t)\rangle$$

$|\psi(t)\rangle = \begin{pmatrix} a(t) \\ b(t) \end{pmatrix}$ einsetzen in die Schrödingergleichung

$$i\hbar \dot{a}(t) = (E_0 - A)a(t) - \eta\cos(\omega t)\, b(t)$$

$$i\hbar \dot{b}(t) = (E_0 + A)b(t) - \eta\cos(\omega t)\, a(t)$$

Ansatz:

$$a(t) = e^{-i(E_0 - A)t/\hbar}\alpha(t)$$

$$b(t) = e^{-i(E_0 + A)t/\hbar}\beta(t)$$

…(Blatt 7) einsetzen und ausrechnen

$$2i\dot{\alpha} = -\omega_1 \beta(t)\left(e^{i(\omega-\omega_0)t} + e^{-i(\omega+\omega_0)t}\right)$$

$$2i\dot{\beta} = -\omega_1 \alpha(t)\left(e^{-i(\omega-\omega_0)t} + e^{i(\omega+\omega_0)t}\right)$$

mit $\hbar\omega_0 = 2A$, $\hbar\omega_1 = \eta$

(exakte numerische Lösung siehe Übung 7)

Für $\omega \approx \omega_0$ (nahe Resonanz) gilt $\omega-\omega_0 \ll \omega+\omega_0$

'Rotating Wave Approximation (RWA)' man vernachlässigt die schnell rotierenden Terme.

$$\Leftrightarrow 2i\ddot{\alpha}(t) = -\omega_1 \dot{\beta}(t)\, e^{i(\omega-\omega_0)t} - \omega_1 \beta(t)\, i(\omega-\omega_0)\, e^{i(\omega-\omega_0)t}$$

einsetzen der 2. Gleichung

$$\Rightarrow \ddot{\alpha}(t) - i\dot{\alpha}(t)(\omega-\omega_0) + \frac{\omega_1^2}{4}\alpha(t) = 0$$