Ex4 Blatt 7 Angelo Brade, Noa Goedee, Jonas Wortmann 12.06.2024

QM angular momentum: $\hat{L}$ $\hat{L}^2 Y_{l,m_l}(\theta,\varphi) = \hbar^2 l(l+1) Y_{l,m_l}(\theta,\varphi)$

$\hat{L}^z |l,m_l\rangle = \hbar m_l |l,m_l\rangle$

$L = \sum_i l_i$ mit $l_i = l(e_i)$ (e_i := i. Valenzelektron)

angular quantum number: $l < n$, $m = -l, \dots, l$

Electron spin (in electron spin space): $\hat{S}$ $\hat{S}^2 |s,m_s\rangle = \hbar^2 s(s+1) |s,m_s\rangle$

spin quantum number: s

Spin projection Number: $m_s = -s, -s+1, \dots, s-1, s$

Angular Momentum: $\hat{J} = \hat{L} + \hat{S}$, $j = l \pm s$

Proton spin (in nuclear spin space): $\hat{I}$

: I =

: $m_I = -I, -I+1, \dots, I-1, I$?

total angular Momentum: $\hat{F} = \hat{I} + \hat{J}$, $F = I \pm J$

$m_F = -F, \dots, F$

Notation: $n^{2s+1} l_j$ (Bsp.: $2^2P_{\frac{3}{2}} \Rightarrow 2 = n$, $l = p = 1$, $j = \frac{3}{2}$, $s = \frac{1}{2}$)

Aufgabe 1:

a) $F = I \pm J$ | $I = \frac{7}{2}$, $6^2S_{1/2} \hat{=} n = 6, s = \frac{1}{2}, l = 0, j = \frac{1}{2} \Rightarrow L = 0, S = \frac{1}{2}, J = L + S$,

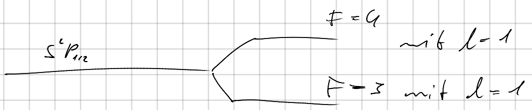
$= \frac{7}{2} \pm \frac{1}{2}$

$\in \{4, 3\}$

$\Rightarrow m_F \in ([-4,4] \cup [-3,3]) \in \mathbb{N}$

$J = \frac{1}{2}: m_J = \pm\frac{1}{2}$, $I = \frac{7}{2}: m_I = \{\frac{7}{2}, \frac{5}{2}, \frac{3}{2}, \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}, -\frac{3}{2}, -\frac{5}{2}, -\frac{7}{2}\}$

b)



Das l bleibt gleich $\Rightarrow$ Parität bleibt gleich $\Rightarrow$ mag. Dipolübergang

c)

$E_{HFS}(F) = \frac{A}{2}(F(F+1) - J(J+1) - I(I+1))$

$E = |E_{HFS}(F=4) - E_{HFS}(F=3)|$ | $J = \frac{1}{2}$, $I = \frac{7}{2}$

$\hbar\omega = |A\frac{7}{4} + A\frac{9}{4}|$

$\Rightarrow A = \frac{\hbar\omega}{4} = \frac{\frac{h}{2\pi}\cdot 2\pi\Delta\nu}{4} = \frac{h}{4}\Delta\nu = 1{,}52 \cdot 10^{-24}\,J = 230 \cdot 10^{7}\,\frac{1}{s}$

d) Die Atom-Uhr muss von externen Magnetfeldern abgeschirmt werden, da sonst das anliegende Magnetfeld verfälscht wird und der annormale Zeeman-Effekt die Energiezustände weiter aufspaltet und so verschiedene Übergangsfrequenzen resultieren.

Aufgabe 2:

a) E1: $\Delta j = 0, \pm 1$, $\Delta l = \pm 1$, $\Delta m_j = 0, \pm 1$, Δm = beliebig

Es sind folgende Übergänge erlaubt:

Außerdem sind alle anderen Sis auf $S \leftrightarrow D$, $S \leftrightarrow S$, $D \leftrightarrow D$, $P \leftrightarrow P$, $P_{1/2} \leftrightarrow D_{5/2}$ und $5P \leftrightarrow 3D$ möglich.

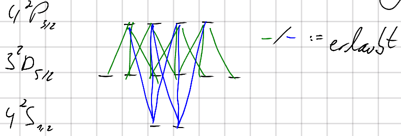
b) M1: $\Delta m = 0$, $\Delta l = 0$, $\Delta m_l = 0, \pm 1$, $\Delta m_s = 0, \pm 1$, $m_j = 0, \pm 1$

Außerdem sind alle anderen Sis auf $S \leftrightarrow D$, $D \leftrightarrow P$ und $P \leftrightarrow S$ möglich.

$\Rightarrow S \leftrightarrow S$, $P \leftrightarrow P$, $D \leftrightarrow D$, $P_{1/2} \leftrightarrow D_{5/2}$ und $5P \leftrightarrow 3D$ sind zusätzlich möglich.

c) $\Delta m_j = 0, \pm 1$

Folgendes stellt alle erlaubten Zustände Farbig dar:



Aufgabe 3: Übergangsmatrixelemente **10 Punkte**

Jonas Wortmann
Angelo Brade
Noa Goedee (diesen Teil geschrieben)

Betrachten Sie den 2p ↔ 1s Übergang im Wasserstoffatom unter Vernachlässigung der Feinstruktur.

a) Bestimmen Sie die z-Komponente des Übergangsmatrixelement des o.g. Übergangs.
Hinweis: Evtl. benötigen Sie das Integral

$$\int_0^\infty \frac{r^n}{a_0^n} \exp(-\alpha \frac{r}{a_0}) dr = \frac{n!}{\alpha^{n+1}} a_0.$$

b) Berechnen Sie die Übergangsfrequenz, die Einstein-A- und B-Koeffizienten des Übergangs sowie die Lebensdauer $\tau = 1/\Gamma = 1/A$ des 2p-Zustandes.
Hinweis: Für den Einstein-A-Koeffizienten gilt

$$A = \frac{2}{3} \frac{\omega^3}{\varepsilon_0 c^3 \hbar} |\mu_{21,q}|^2.$$

Zur Berechnung benötigen Sie nur die z-Komponente des Übergangsmatrixelements $\mu_{21,q}$. Der Zustand 2p ($m_l = 0$) zerfällt nur als π-Übergang, die Zustände 2p ($m_l = \pm 1$) nur als $\sigma_\pm$-Übergang. Da die Raten jeweils gleich sind, entspricht die Gesamtrate den Einzelraten.

$$\psi_{1s} = \frac{1}{\sqrt{\pi a_0^3}} e^{-\frac{r}{a_0}} \quad , \psi_{2p} = \frac{1}{8\sqrt{2\pi a_0^5}} r\cos(\theta)\, e^{-\frac{r}{2a_0}} \quad , \text{ for } m_\ell = 0$$

$$\mu_{21,z} = e\langle 2p|z|1s\rangle = e\int \psi_{2p}^* \, z\, \psi_{1s}\, d^3r = \int_0^\infty \int_0^\pi \int_0^{2\pi} \psi_{2p}^* (r\cos(\theta)) \psi_{1s}\, r^2 \sin(\theta) dr\, d\theta\, d\varphi \quad , z = r\cos(\theta)$$

$$= e \frac{1}{8\sqrt{2}\pi} \underbrace{\int_0^\infty \frac{r^4}{a_0^4} e^{-\frac{3r}{2a_0}} dr}_{= \frac{24}{(\frac{3}{2})^4} a_0} \underbrace{\int_0^\pi \cos^2(\theta) \sin(\theta) d\theta}_{= 2/3} \underbrace{\int_0^{2\pi} d\varphi}_{= 2\pi} = e \frac{2^7}{\sqrt{2}\, 3^5} a_0$$

(b)

$$\omega = \frac{E_{2p} - E_{1s}}{\hbar} \quad , E_{2p} = -\frac{13{,}6\,eV}{4} \quad , E_{1s} = -13{,}6\,eV$$

$$A = \frac{2\omega^3}{3\varepsilon_0 c^3 \hbar} |\mu_{21,q}|^2 \quad , \tau = \frac{1}{\Gamma} = \frac{1}{A}$$

$$\rightsquigarrow \omega = \frac{10{,}2\,eV}{\hbar} \approx 1{,}54 \cdot 10^{16}\,Hz$$

$$\varepsilon_0 = 8{,}854 \cdot 10^{-12} \frac{As}{Vm} , c \simeq 3{,}8 \cdot 10^8 \frac{m}{s} \quad , h = 6{,}626 \cdot 10^{-34} Js \quad , a_0 = 5{,}292 \cdot 10^{-11} m \quad , e = 1{,}602 \cdot 10^{-19} J$$

$$A = \frac{2\,(1{,}54 \cdot 10^{16}\,Hz)^3}{3 \cdot 8{,}854 \cdot 10^{-12} \frac{As}{Vm} \cdot (3{,}8 \cdot 10^8 \frac{m}{s})^3 \cdot 6{,}626 \cdot 10^{-34} Js} \cdot \left| \frac{2^7}{\sqrt{2} \cdot 3^5} \cdot 5{,}292 \cdot 10^{-11} m \cdot 1{,}602 \cdot 10^{-19} J \right|^2$$

$$= 7{,}542 \cdot 10^7 \frac{1}{s} \qquad \Rightarrow \tau = 1{,}326 \cdot 10^{-8} s$$

$$\frac{A}{B} = \frac{\omega^3 \hbar}{\pi^2 c^3} \quad \Leftrightarrow B = \frac{A c^3 \pi^2}{\omega^3 \hbar} \quad \Rightarrow B = 1{,}06 \cdot 10^{20} \frac{m^3}{J}$$

★ Aufgabe 4: Zwei-Niveau-System **12 Punkte**

Gegeben ist ein Zwei-Niveau-Atom mit den Zuständen $|g\rangle$ und $|e\rangle$. Die Eigenenergien sind durch den atomaren Hamiltonoperator $\hat{H}_0$ gegeben mit $\hat{H}_0|g\rangle = \hbar\omega_g|g\rangle$ und $\hat{H}_0|e\rangle = \hbar\omega_e|e\rangle$. Die beiden Zustände werden nun durch ein Lichtfeld mit dem Wechselwirkungshamiltonoperator

$$\hat{H}_i = -\hat{\vec{d}}\cdot\vec{E}\cos(\omega_L t - \vec{k}\cdot\vec{r})$$

gekoppelt. Dabei ist $\hat{\vec{d}}$ der Dipoloperator, $\vec{E}$ die Amplitude des elektrischen Felds, ω_L die Laserfrequenz und $\vec{k}$ der Wellenvektor.

a) Als Lösungsansatz wird die Wellenfunktion $|\psi(t)\rangle = c_g(t)|g\rangle + c_e(t)|e\rangle$ gewählt, so dass die gesamte Zeitabhängigkeit durch die Koeffizienten c_g und c_e bestimmt ist. Setzen Sie $|\psi(t)\rangle$ in die Schrödingergleichung $i\hbar\dot{\psi} = (\hat{H}_0 + \hat{H}_i)\psi$ ein und multiplizieren Sie von links jeweils mit $\langle g|$ bzw. $\langle e|$. Zeigen Sie, dass Sie so folgendes Ergebnis erhalten:

$$\begin{aligned} i\hbar\dot{c_g} &= \hbar\omega_g c_g + \langle g|\hat{H}_i|e\rangle c_e, \\ i\hbar\dot{c_e} &= \hbar\omega_e c_e + \langle e|\hat{H}_i|g\rangle c_g. \end{aligned}$$

b) In der sogenannten Dipolnäherung wird der Wechselwirkungsterm $\langle ...|\hat{H}_i|...\rangle$ durch $-\vec{E}\frac{1}{2}\left(e^{i\omega_L t} + e^{-i\omega_L t}\right)\langle ...|e\hat{\vec{r}}|...\rangle$ genähert. e ist die Elektronenladung. Was bedeutet diese Näherung physikalisch?

c) Um die beiden gekoppelten Differentialgleichungen aus a) zu lösen wird nun der Ansatz

$$\begin{aligned} c_g(t) &= \tilde{c_g}(t)e^{-i\omega_g t}, \\ c_e(t) &= \tilde{c_e}(t)e^{-i\omega_e t} \end{aligned}$$

gewählt. Setzen Sie dies in die Gleichungen aus a) ein und ermitteln Sie die neuen gekoppelten Gleichungen für $\tilde{c_g}$ und $\tilde{c_e}$ unter Berücksichtigung der Dipolnäherung.

d) Zur weiteren Vereinfachung wird $\omega_e - \omega_g = \omega_{ge}$ und $\omega_L - \omega_{ge} = \Delta$ gesetzt. Des Weiteren werden in der sogenannten Rotating-Wave-Approximation Terme mit $\omega_L + \omega_{ge}$ vernachlässigt. Was bedeutet dies physikalisch? Zeigen Sie, dass die Rotating-Wave-Approximation zu

$$\begin{aligned} \dot{\tilde{c_g}}(t) &= -\tfrac{i}{2}\Omega e^{i\Delta t}\tilde{c_e}(t), \\ \dot{\tilde{c_e}}(t) &= -\tfrac{i}{2}\Omega^* e^{-i\Delta t}\tilde{c_g}(t) \end{aligned}$$

führt. $\Omega = -\vec{E}\cdot\langle\hat{\vec{d}}_{ge}\rangle/\hbar$ ist die Rabifrequenz.

e) Lösen Sie die Differentialgleichung aus d) für reelle Rabifrequenzen ($\Omega = \Omega^*$). Plotten Sie für verschiedene Ω und Δ die Wahrscheinlichkeiten das Atom zur Zeit t in $|g\rangle$ bzw. $|e\rangle$ zu finden, wenn sich das Atom bei $t = 0$ in $|g\rangle$ befindet, d.h. $c_g(t=0) = 1$ und $c_e(t=0) = 0$.
Hinweis: Sinnvolle Werte für die Plots sind $\Omega, \Delta = 0...10\,\mu s^{-1}$ bei $t = 0...10\,\mu s$.

(a) $\hat{H}_0|g\rangle = \hbar\omega_g|g\rangle \wedge \hat{H}_0|e\rangle = \hbar\omega_e|e\rangle$

$\hat{H}_i = -\hat{d}\vec{E}\cos(\omega_L t - \vec{k}\cdot\vec{r})$

$|\psi(t)\rangle = c_g(t)|g\rangle + c_e(t)|e\rangle$

$\rightsquigarrow i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\psi(t)\rangle = (\hat{H}_0 + \hat{H}_i)|\psi(t)\rangle$

$\Leftrightarrow i\hbar\left(\frac{\partial c_g(t)}{\partial t}|g\rangle + \frac{\partial c_e(t)}{\partial t}|e\rangle\right) = \hat{H}_0(c_g(t)|g\rangle + c_e(t)|e\rangle) + \hat{H}_i(c_g(t)|g\rangle + c_e(t)|e\rangle)$

$= c_g(t)\hbar\omega_g|g\rangle + c_e(t)\hbar\omega_e|e\rangle + c_g(t)\hat{H}_i|g\rangle + c_e(t)\hat{H}_i|e\rangle$

$\Rightarrow \langle g|i\hbar\frac{\partial c_g(t)}{\partial t}|g\rangle + \langle g|i\hbar\frac{\partial c_e(t)}{\partial t}|e\rangle = \langle g|c_g(t)\hbar\omega_g|g\rangle + \langle g|c_e(t)\hbar\omega_e|e\rangle + \langle g|c_g(t)\hat{H}_i|g\rangle + \langle g|c_e(t)\hat{H}_i|e\rangle$

$\Leftrightarrow i\hbar\frac{\partial c_g(t)}{\partial t} = c_g(t)\hbar\omega_g + c_e(t)\langle g|\hat{H}_i|e\rangle$

$\Rightarrow \langle e|i\hbar\frac{\partial c_g(t)}{\partial t}|g\rangle + \langle e|i\hbar\frac{\partial c_e(t)}{\partial t}|e\rangle = \langle e|c_g(t)\hbar\omega_g|g\rangle + \langle e|c_e(t)\hbar\omega_e|e\rangle + \langle e|c_g(t)\hat{H}_i|g\rangle + \langle e|c_e(t)\hat{H}_i|e\rangle$

$\Leftrightarrow i\hbar\frac{\partial c_e(t)}{\partial t} = c_e(t)\hbar\omega_e + c_g(t)\langle e|\hat{H}_i|g\rangle$

(b)

$\langle\psi|\hat{H}_i|\phi\rangle = \langle\psi|-\hat{d}\cdot\vec{E}\,\frac{1}{2}(e^{i\omega_L t} + e^{-i\omega_L t})|\phi\rangle$

$= -\vec{E}\,\frac{1}{2}(e^{i\omega_L t} + e^{-i\omega_L t})\langle\psi|\hat{d}|\phi\rangle$

Die Dipolnäherung reduziert die Komplexität der Wechselwirkungs-Hamiltonschen, indem sie davon ausgeht, dass das elektrische Feld im gesamten Atom gleichförmig ist, sodass die Wechselwirkung durch einfache zeitabhängige oszillierende Terme ausgedrückt werden können.
Das erleichtert die Lösung der Schrödinger-Gleichung für das Zwei-Niveau-System.

(c)

$c_g(t) = \tilde{c}_g(t)e^{-i\omega_g t} \rightsquigarrow i\hbar\frac{\partial}{\partial t}c_g(t) = i\hbar\left(\frac{\partial}{\partial t}\tilde{c}_g(t) + \tilde{c}_g(t)(-i\omega_g)\right)e^{-i\omega_g t}$

$\Rightarrow i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\tilde{c}_g(t) + \hbar\omega\tilde{c}_g(t) = \hbar\omega_g\tilde{c}_g(t) + \langle g|\hat{H}_i|e\rangle\tilde{c}_e(t)e^{-i(\omega_e - \omega_g)t}$

$\Leftrightarrow i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\tilde{c}_g(t) = \langle g|\hat{H}_i|e\rangle\tilde{c}_e(t)e^{-i\Delta\omega t} \quad , \Delta\omega = \omega_e - \omega_g$

$\Leftrightarrow i\hbar\frac{d\tilde{c}_g(t)}{dt} = -\vec{E}\vec{d}_{ge}\frac{1}{2}(e^{i\omega_L t} + e^{-i\omega_L t})\tilde{c}_e(t)e^{-i\Delta\omega t}$

$c_e(t) = \tilde{c}_e(t)e^{-i\omega_e t} \rightsquigarrow i\hbar\frac{\partial}{\partial t}c_e(t) = i\hbar\left(\frac{\partial}{\partial t}\tilde{c}_e(t) + \tilde{c}_e(t)(-i\omega_e)\right)e^{-i\omega_e t}$

$\Rightarrow i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\tilde{c}_e(t) = \langle g|\hat{H}_i|e\rangle\tilde{c}_g(t)e^{i\Delta\omega t}$

$\Leftrightarrow i\hbar\frac{d\tilde{c}_e(t)}{dt} = -\vec{E}\vec{d}_{eg}\frac{1}{2}(e^{i\omega_L t} + e^{-i\omega_L t})\tilde{c}_g(t)e^{i\Delta\omega t}$

(d)

mit $\omega_e - \omega_g = \omega_{ge}$, $\Delta = \omega_L - \omega_{ge}$ und Vernachlässigung von Termen mit $\omega_L + \omega_{ge}$:

$$i\hbar \frac{d\hat{\tilde{c}}_g(t)}{dt} = -\vec{E}\cdot\vec{d}_{ge}\,\frac{1}{2}\,e^{i\Delta t}\,\tilde{c}_e(t) \;\wedge\; i\hbar\frac{d\hat{\tilde{c}}_e(t)}{dt} = -\vec{E}\,\vec{d}_{eg}\,\frac{1}{2}\,e^{-i\Delta t}\,\tilde{c}_g(t)$$

mit $\Omega = -\vec{E}\cdot\vec{d}_{ge}\,\frac{1}{\hbar}$:

$$i\hbar\frac{d\tilde{c}_g(t)}{dt} = \hbar\,\Omega\,\frac{1}{2}\,e^{i\Delta t}\,\tilde{c}_e(t) \;\wedge\; i\hbar\frac{d\tilde{c}_e(t)}{dt} = \hbar\,\Omega^*\,\frac{1}{2}\,e^{-i\Delta t}\,\tilde{c}_g(t)$$

$$= -\frac{i\Omega}{2}\,e^{i\Delta t}\,\tilde{c}_e(t) \qquad\qquad = -\frac{i\Omega^*}{2}\,e^{-i\Delta t}\,\tilde{c}_g(t)$$

(e)

bei $t=0$: $\tilde{c}_g(0) = 1$, $\tilde{c}_e(0) = 0$