Lösung Blatt 3

15.11.11

Aufgabe 8

Teilaufgabe a)

Der Hamilton-Operator des Systems ist,

$$H_0 = -\omega \left(S_{z1} + S_{z2} \right) . \tag{1}$$

Es ist sofort offensichtlich das es zwei Zustände gibt die Entartet sind.

$$H_0 | + - \rangle = 0 \ , \ H_0 | - + \rangle = 0 \tag{2}$$

Die Korrektur in niedrigster Ordnung Störtheorie ist dadurch gegeben das wir den Störhamilton-Operator in der Basis der entarteten Zustände Diagonalisieren. Die Störung ist gegeben durch,

$$H_1 = \lambda S_{x1} S_{x2} \ \ , \ \ S_{xi} = \frac{\hbar}{2} (\sigma_{+i} + \sigma_{-i}) \, . \tag{3}$$

Damit ergibt sich,

$$\langle + - | H_1 | + - \rangle = 0 \ , \ \langle - + | H_1 | - + \rangle = 0 \tag{4}$$

$$\langle - + | H_1 | + - \rangle = \frac{\hbar^2}{4} \lambda \ . \tag{5}$$

In der Basis der entarteten Zustände lässt sich der Hamilton-Operator H_1 also schreiben als,

$$H_1 = \frac{\hbar^2}{4} \lambda \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} . \tag{6}$$

Die Eigenbasis ist damit auch klar

$$|s\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(| + - \rangle + | - + \rangle \right) \ , \ |a\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(| + - \rangle - | - + \rangle \right) . \tag{7}$$

Damit ergeben sich die Korrekturen in niedrigster Ordnung,

$$E_s = \frac{\hbar^2}{4} \lambda \ \ , \ \ E_a = -\frac{\hbar^2}{4} \lambda \, . \tag{8}$$

Teilaufgabe b)

Ein Teilchen in einem quartischen Potential kann beschrieben werden durch den Dimensionslosen Hamiltonian,

$$H = p^2 + q^4 \ , \ [q, p] = i \, . \tag{9}$$

Die Eigenwert Gleichung für die Wellenfunktion lässt sich schreiben als,

$$\left[-\frac{d^2}{dq^2} + q^4 \right] \psi(q) = \epsilon \psi(q) \, . \tag{10}$$

Wir wählen den Ansatz,

$$\psi(q) = \frac{1}{\sqrt{\lambda}} \left(\frac{2}{\pi} \right)^{1/4} e^{-(q/\lambda)^2} \, . \tag{11}$$

Nun berechnen wir,

$$f(\lambda) = \int dq \psi(q) \left[-\frac{d^2}{dq^2} + q^4 \right] \psi(q) = \frac{1}{\lambda^2} + \frac{3\lambda^4}{16} \, . \tag{12}$$

Nun minimieren wir $f(\lambda)$,

$$\partial_\lambda f(\lambda) = 0 \ \Rightarrow \ \lambda = \frac{\sqrt{2}}{3^{1/6}} \, . \tag{13}$$

Mit dieser Wahl für λ ergibt sich

$$\int dq \psi(q) \left[-\frac{d^2}{dq^2} + q^4 \right] \psi(q) = \frac{3\, 3^{1/3}}{4} \approx 1.082 \tag{14}$$

Damit haben wir eine gute Näherung der echten Grundzustandsenergie gefunden.

Aufgabe 9

Teilaufgabe a)

Die Bewegungsgleichung für den Zeitentwicklungsoperator ist gegeben durch,

$$-\frac{\hbar}{i} \frac{dU}{dt} = HU(t, t_0) \tag{15}$$

Wir definieren,

$$U_0(t, t_0) = e^{-\frac{i}{\hbar} H_0 (t - t_0)} \tag{16}$$

Nun, suchen wir U' mit der Eigenschaft,

$$U(t, t_0) = U_0(t, t_0) U'(t, t_0) \tag{17}$$

Wir setzen das in die Gleichung 15,

$$\begin{aligned} -\frac{\hbar}{i} \left(\frac{dU_0}{dt} \right) U' - \frac{\hbar}{i} U_0 \left(\frac{dU'}{dt} \right) &= (H_0 + H_1(t)) U_0 U' && (18) \\ -\frac{\hbar}{i} U_0 \left(\frac{dU'}{dt} \right) &= H_1(t) U_0 U' && (19) \\ -\frac{\hbar}{i} \left(\frac{dU'}{dt} \right) &= U_0^\dagger H_1(t) U_0 U' && (20) \end{aligned}$$

Somit ergibt sich die Integral Gleichung,

$$U'(t,t_0) = 1 - \frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t} U_0^\dagger H_1(\tau) U_0 U' d\tau \tag{21}$$

Wir können jetzt die Integral Gleichung in sich selbst Einsetzen und brechen die Entwicklung in niedrigster Ordnung ab. Somit ergibt sich die Übergangswahrscheinlichkeit,

$$\begin{aligned}
& \langle n'l'm'|U(t,t_0)|nlm\rangle = \langle n'l'm'|U_0(t,t_0)U'(t,t_0)|nlm\rangle & (22)\\
= & -\frac{i}{\hbar} e^{-iE_{n'l'm'}(t-t_0)/\hbar}\int_{t_0}^{t} d\tau_1 e^{iE_{n'l'm'}(\tau_1-t_0)/\hbar}\langle n'm'l'|H_1(\tau_1)|nlm\rangle e^{-iE_{nlm}(\tau_1-t_0)} & (23)\\
= & -\frac{ie|\vec{E}|}{\hbar} e^{-iE_{n'l'm'}(t-t_0)/\hbar}\int_{t_0}^{t} d\tau_1 e^{iE_{n'l'm'}(\tau_1-t_0)/\hbar}\langle n'l'm'|\vec{e}_0\cdot\vec{r}|nlm\rangle e^{-iE_{nlm}(\tau_1-t_0)}\cos(\omega\tau_1)
\end{aligned}$$

mit $e_0 = \vec{E}/|\vec{E}|$. Nun ergibt sich $(t_0 = 0)$,

$$\begin{aligned}
|\langle n'l'm'|U(t,t_0)|nlm\rangle| &= \frac{e|\vec{E}|}{\hbar}\left|\int_0^t d\tau_1 e^{iE_{n'l'm'}\tau_1/\hbar}\langle n'l'm'|\vec{e}_0\cdot\vec{r}|nlm\rangle e^{-iE_{nlm}\tau_1}\cos(\omega\tau_1)\right|\\
&= \frac{e|\vec{E}|}{\hbar}\left|\langle n'l'm'|\vec{e}_0\cdot\vec{r}|nlm\rangle\int_0^t d\tau_1 e^{i(E_{n'l'm'}-E_{nlm})\tau_1}\cos(\omega\tau_1)\right| .
\end{aligned}$$

Jetzt definiere ich

$$\omega_\pm = (E_{n'l'm'} - E_{nlm}) \pm \omega\,. \tag{24}$$

Damit ergibt sich das Standard Resultat für die Goldene Regel,

$$|\langle n'l'm'|U(t,t_0)|nlm\rangle| = \frac{e|\vec{E}|}{2\hbar}\left|\langle n'l'm'|\vec{e}_0\cdot\vec{r}|nlm\rangle\left[\frac{\sin(\omega_+t/2)}{\omega_+/2}e^{i\omega_+t/2} + \frac{\sin(\omega_-t/2)}{\omega_-/2}e^{i\omega_-t/2}\right]\right| . \tag{25}$$

Mit der auf dem Aufgabenblatt gegebenen Relation erhält man dann,

$$\lim_{t\to\infty}|\langle n'l'm'|U(t,t_0)|nlm\rangle|^2 = \frac{e^2|\vec{E}|^2\pi t}{2\hbar^2}|\langle n'l'm'|\vec{e}_0\cdot\vec{r}|nlm\rangle|^2\left(\delta(\omega_+)+\delta(\omega_-)\right) \tag{26}$$

Abgeleitet nach der Zeit ergibt sich damit die Rate,

$$\Gamma = \frac{e^2|\vec{E}|^2\pi}{2\hbar^2}|\langle n'l'm'|\vec{e}_0\cdot\vec{r}|nlm\rangle|^2\left(\delta(\omega_+)+\delta(\omega_-)\right)\,. \tag{27}$$

Teilaufgabe b)

Ein kurze Vorbemerkung: die einzige Schwierigkeit in dieser Aufgabe ist die Berechnung des Matrixelements. Dementsprechend beschränkt sich diese Lösung nur darauf.

In Kugel Koordinaten ist der Eigenzustand des Wasserstoff Atoms gegeben durch

$$\langle r,\theta,\varphi|nlm\rangle = R_{nl}(r)Y_l^m \tag{28}$$

Der Operator im Matrix Element $\vec{e}_0\cdot\vec{r}$ ist gegeben durch,

$$\vec{e}_0\cdot\vec{r} = r\left(e_x\sin\theta\cos\varphi + e_y\sin\theta\sin\varphi + e_z\cos\theta\right) \tag{29}$$

mit $e_i = E_i/|\vec{E}|$. Nun benutzen wir die Kugelflächenfunktionen

$$\cos\theta = \sqrt{\frac{4\pi}{3}} Y_1^0(\theta,\varphi)\ ,\ Y_0^0(\theta,\varphi) = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}\ ,\ \mp\sin\theta e^{\pm i\varphi} = \sqrt{\frac{8\pi}{3}} Y_1^{\pm 1}(\theta,\varphi)$$

Damit können wir den Operator umschreiben,

$$\vec{e}_0\cdot\vec{r} = \sqrt{\frac{4\pi}{3}} r \left(-e_x \frac{Y_1^1(\theta,\varphi) - Y_1^{-1}(\theta,\varphi)}{\sqrt{2}} - e_y \frac{Y_1^1(\theta,\varphi) + Y_1^{-1}(\theta,\varphi)}{i\sqrt{2}} + e_z Y_1^0(\theta,\varphi)\right) \tag{30}$$

Damit ergibt sich für das Matrix Element,

$$\begin{aligned}
\langle 3lm|\vec{e}_0\cdot\vec{r}|100\rangle &= \frac{1}{\sqrt{3}} \int drr^3 R_{3l}(r) R_{10}(r) \int d\Omega Y_l^m(\theta,\varphi) \qquad (31)\\
&\quad \left(-e_x \frac{Y_1^1(\theta,\varphi) - Y_1^{-1}(\theta,\varphi)}{\sqrt{2}} - e_y \frac{Y_1^1(\theta,\varphi) + Y_1^{-1}(\theta,\varphi)}{i\sqrt{2}} + e_z Y_1^0(\theta,\varphi)\right)\\
&= \frac{1}{\sqrt{3}} \int drr^3 R_{3l}(r) R_{10}(r) \left(\frac{-e_x + ie_y}{\sqrt{2}} \delta_{m,1}\delta_{l,1} + \frac{e_x + ie_y}{\sqrt{2}} \delta_{m,1}\delta_{l,1} + e_z \delta_{m,0}\delta_{l,1}\right)\\
&= \delta_{l1} \frac{1}{\sqrt{3}} \int drr^3 R_{31}(r) R_{10}(r) \left(\frac{-e_x + ie_y}{\sqrt{2}} \delta_{m,1} + \frac{e_x + ie_y}{\sqrt{2}} \delta_{m,1} + e_z \delta_{m,0}\right)
\end{aligned}$$

Die Radialfunktion ist gegeben durch,

$$R_{31} = \left(\frac{1}{a_0}\right)^{3/2} \frac{2\sqrt{2}}{3^4\sqrt{3}} \frac{r}{a_0} \left(6 - \frac{r}{a_0}\right) e^{-r/3a_0} \tag{32}$$

$$R_{10} = \frac{2}{a_0^{3/2}} e^{-r/a_0} \tag{33}$$

Damit ergibt sich

$$\langle 3lm|\vec{e}_0\cdot\vec{r}|100\rangle = \delta_{l1} \frac{27}{64} \sqrt{\frac{3}{2}} a_0 \left(\frac{-e_x + ie_y}{\sqrt{2}} \delta_{m,1} + \frac{e_x + ie_y}{\sqrt{2}} \delta_{m,1} + e_z \delta_{m,0}\right) \tag{34}$$

Wir sehen hier das für eine Elektrisches Feld das nur eine Komponente in z-Richtung hat keine Übergänge möglich sind die m ändern.

Aufgabe 10

Teilaufgabe a)

Zu zeigen ist:

$$e^{i\vec{a}\cdot\vec{\sigma}} = \mathbf{1}\cos a + i(\vec{n}\cdot\vec{\sigma})\sin a, \tag{35}$$

Zuerst stellen wir fest das gilt,

$$(\vec{n}\cdot\vec{\sigma})^2 = \mathbf{1} \tag{36}$$

und damit gilt auch,

$$(\vec{n}\cdot\vec{\sigma})^{2n} = \mathbf{1} \tag{37}$$

und

$$(\vec{n}\cdot\vec{\sigma})^{2n+1} = \vec{n}\cdot\vec{\sigma} \tag{38}$$

Nun schreiben wir die e-Funktion als summe,

$$e^{i\vec{a}\cdot\vec{\sigma}} = \sum_n \frac{i^n}{n!} a^n (\vec{n}\cdot\vec{\sigma})^n \tag{39}$$

$$= \sum_n \frac{(-1)^n}{2n!} a^{2n} (\vec{n}\cdot\vec{\sigma})^{2n} + i \sum_n \frac{(-1)^n}{(2n+1)!} a^{2n+1} (\vec{n}\cdot\vec{\sigma})^{2n+1} \tag{40}$$

$$= \mathbf{1}\cos a + i(\vec{n}\cdot\vec{\sigma})\sin a \tag{41}$$

Teilaufgabe b)

Die Pauli Matrizen sind gegeben durch

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \;,\; \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \;,\; \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \tag{42}$$

Bei Matrix Multiplikation ist sofort feststellbar,

$$\sigma_x^2 = \sigma_y^2 = \sigma_z^2 = 1 \tag{43}$$

Von den Fundamentalen Vertauschungsrelationen wissen wir außerdem das gilt,

$$\sigma_i \sigma_j = -\sigma_j \sigma_i \tag{44}$$

und zu guter Letzt,

$$\sigma_x\sigma_y = i\sigma_z \;,\; \sigma_y\sigma_z = i\sigma_x \;,\; \sigma_z\sigma_x = i\sigma_y \tag{45}$$

D.h. wir haben nun gezeigt,

$$\sigma_i\sigma_j = \delta_{ij}\mathbf{1} + i\sum \epsilon_{ijk}\sigma_k \tag{46}$$

Nun die zu zeigende Relation,

$$(\vec{\sigma}\cdot\vec{a})(\vec{\sigma}\cdot\vec{b}) = \vec{a}\cdot\vec{b}\,\mathbf{1} + i\vec{\sigma}\cdot(\vec{a}\times\vec{b}) \,, \tag{47}$$

Wir schreiben das um in die einzelnen Komponenten,

$$(\vec{\sigma}\cdot\vec{a})(\vec{\sigma}\cdot\vec{b}) = \sum_i \sum_j a_i b_j \sigma_i \sigma_j \tag{48}$$

$$= \sum_i \sum_j a_i b_j (\mathbf{1}\delta_{ij} + i\sum_k \epsilon_{ijk}\sigma_k) \tag{49}$$

$$= \vec{a}\cdot\vec{b}\,\mathbf{1} + i\vec{\sigma}\cdot(\vec{a}\times\vec{b}) \tag{50}$$