

# Experimentalphysik IV (PEP4)

Dozent. Prof. S. Jochim

## Übung 4

Abgabe am Montag, den 12.5.2014 vor der Vorlesung

### Aufgabe 1: Oszillation des elektrischen Dipols (6P)

Aus der klassischen Elektrodynamik wissen wir, dass ein schwingender elektrischer Dipol elektromagnetische Strahlung emittiert. In der Quantenmechanik muss der Erwartungswert des Dipoloperators ( $\hat{D} = -e\vec{R}$ ) bestimmt werden. Wir betrachten H(1s) und H(2p) Zustände ( $\psi_{1,0,0}$  und  $\psi_{2,1,m}$ ).

- a) Zeigen Sie (ohne explizite Rechnung), dass der Erwartungswert des Operators  $\hat{D}$  gleich Null ist, wenn das System in einem stationären Zustand ist. Z.B:

$$\begin{aligned}\langle \psi_{1,0,0} | \hat{D} | \psi_{1,0,0} \rangle &= 0 \\ \langle \psi_{2,1,m} | \hat{D} | \psi_{2,1,m} \rangle &= 0\end{aligned}$$

**Bemerkung:** Nutzen Sie, dass die Kugelwellenfunktionen  $Y_{lm}$  unter Spiegelung am Ursprung ( $\vec{r} \rightarrow -\vec{r}$ ) entweder gerade oder ungerade Funktionen sind. Also  $Y_{lm}(\vec{r}) = (-1)^l Y_{lm}(-\vec{r})$ . Damit sind die Zustände  $|\psi_{n,l,m}\rangle$  durch ihre Winkelabhängigkeit entweder gerade oder ungerade.

Bei Spiegelung am Ursprung wechselt auch  $\hat{D}$  nach  $-\hat{D}$ : Der elektrische Dipol ist also ein ungerader Operator.

- b) Wir nehmen nun an, dass der Zustandsvektor des Systems am Anfang eine lineare Überlagerung des Grundzustands 1s mit einem der 2p-Zustände ist  $|\Psi_m(t=0)\rangle = \cos \alpha |\psi_{1,0,0}\rangle + \sin \alpha |\psi_{2,1,m}\rangle$  mit  $m = +1, 0$  oder  $-1$  ( $\alpha$  ist ein reeller Parameter). Daraus erhalten wir den Zustandsvektor  $|\Psi_m(t)\rangle = \cos \alpha |\psi_{1,0,0}\rangle + \sin \alpha \cdot e^{-i\omega t} |\psi_{2,1,m}\rangle$  zur Zeit  $t$ . Dabei haben wir den gemeinsamen Phasenfaktor  $e^{-i\frac{E}{\hbar}t}$  weggelassen, da er keine physikalische Bedeutung hat.

Welche Bedeutung hat  $\omega$ ? Berechnen Sie für den Zustandsvektor  $|\Psi_m(t)\rangle$  für die verschiedenen Möglichkeiten für  $m$  den Erwartungswert der x-, y- und z-Komponenten des Dipolmomentes:

$$\langle \hat{D} \rangle_m(t) = \langle \Psi_m(t) | \hat{D} | \Psi_m(t) \rangle$$

Beschreiben Sie das zeitliche Verhalten des Dipolmoments, d.h. seiner Amplitude und Ausrichtung im Raum.

(Bitte wenden)

c) Analogie zum Teilchen im Kastenpotential:

Betrachten Sie dafür die Überlagerung der zwei niedrigsten Eigenzustände

$|\psi(t=0)\rangle = 1/\sqrt{2}(|\psi_1\rangle + |\psi_2\rangle)$  und berechnen Sie den Erwartungswert des Ortes  $\langle\psi|\hat{x}|\psi\rangle$  als Funktion der Zeit.

**Hinweise:** In den Ausdrücken der Erwartungswerte gibt es ein Radialintegral, das wir gleich  $\chi$  setzen  $\chi = \int_0^\infty R_{2,1}(r)R_{1,0}(r)r^3dr$  und ein Winkelintegral. Sie können folgende Ergebnisse verwenden:

$$\begin{aligned}\langle\psi_{2,1,1}|D_x|\psi_{1,0,0}\rangle &= -\langle\psi_{2,1,-1}|D_x|\psi_{1,0,0}\rangle = \frac{e\chi}{\sqrt{6}} \\ \langle\psi_{2,1,0}|D_x|\psi_{1,0,0}\rangle &= 0 \\ \langle\psi_{2,1,1}|D_y|\psi_{1,0,0}\rangle &= \langle\psi_{2,1,-1}|D_y|\psi_{1,0,0}\rangle = -\frac{ie\chi}{\sqrt{6}} \\ \langle\psi_{2,1,0}|D_y|\psi_{1,0,0}\rangle &= 0 \\ \langle\psi_{2,1,1}|D_z|\psi_{1,0,0}\rangle &= \langle\psi_{2,1,-1}|D_z|\psi_{1,0,0}\rangle = 0 \\ \langle\psi_{2,1,0}|D_z|\psi_{1,0,0}\rangle &= -\frac{e\chi}{\sqrt{3}}\end{aligned}$$

### Lösung

- a) Generally, the integral contains the square of the wave function's angular part  $|Y_{l,m}^* Y_{l,m}|$  which is a "gerade" function with respect to the origin (parity "gerade") and the dipole operator which is an "ungerade" function (parity "ungerade"). The product of both always is a "ungerade" function and as result the integral over the full solid angle becomes zero.

Explicit calculation for the s-orbital:

$$\begin{aligned}|\psi_1=\psi_2=\psi_{1,0,0}| &= \frac{1}{\sqrt{4\pi}} \frac{2}{a_0^{3/2}} e^{-\frac{r}{a_0}} \\ \bar{D} &= \int \psi_1^* e\vec{r}\psi_1 dV \\ &= e \int_0^\infty \int_0^\pi \int_0^{2\pi} \psi_1^* (r \sin \theta \cos \varphi \hat{x} + r \sin \theta \sin \varphi \hat{y} + r \cos \theta \hat{z}) \psi_1 r^2 \sin \theta dr d\theta d\varphi \\ &= e \underbrace{\left( \frac{1}{4\pi} \int_0^{2\pi} \int_0^\pi (\sin \theta \cos \varphi \hat{x} + \sin \theta \sin \varphi \hat{y} + \cos \theta \hat{z}) \sin \theta d\theta d\varphi \right)}_{=0} \left( \int_0^\infty \frac{4}{a_0^3} e^{-\frac{2r}{a_0}} r^3 dr \right)\end{aligned}$$

The first term is the integral on the angular components, resulting in 0. So,  $\bar{D}=0$ .

**b)** Here  $\omega = \frac{\Delta E}{\hbar}$ , where  $\Delta E$  is the energy separation of the 1s and 2p states.

$$\langle \hat{D} \rangle(t) = (\cos \alpha \langle \psi_{100} | + e^{i\omega t} \sin \alpha \langle \psi_{21m} |) \hat{D} (| e^{-i\omega t} \sin \alpha | \psi_{21m} \rangle + \cos \alpha | \psi_{100} \rangle)$$

$$= \cos \alpha^2 \langle \psi_{100} | \hat{D} | \psi_{100} \rangle + \cos \alpha \sin \alpha e^{-i\omega t} \langle \psi_{100} | \hat{D} | \psi_{21m} \rangle + \\ \cos \alpha \sin \alpha e^{i\omega t} \langle \psi_{21m} | \hat{D} | \psi_{100} \rangle + \sin \alpha^2 \langle \psi_{21m} | \hat{D} | \psi_{21m} \rangle$$

$$\langle \psi_{100} | \hat{D} | \psi_{100} \rangle \rightarrow 0, \text{ siehe a)}$$

$$\langle \psi_{21m} | \hat{D} | \psi_{21m} \rangle \rightarrow 0, \text{ siehe a)}$$

$$\langle \hat{D} \rangle(t) = \cos \alpha \sin \alpha (e^{i\omega t} \langle \psi_{21m} | \hat{D} | \psi_{100} \rangle + e^{-i\omega t} \langle \psi_{100} | \hat{D} | \psi_{21m} \rangle)$$

|        | $D_x$                                                 | $D_y$                                                | $D_z$                                                 |
|--------|-------------------------------------------------------|------------------------------------------------------|-------------------------------------------------------|
| m = 1  | $\frac{e\chi \cos[t\omega] \sin[2\alpha]}{\sqrt{6}}$  | $\frac{e\chi \sin[2\alpha] \sin[t\omega]}{\sqrt{6}}$ | 0                                                     |
| m = 0  | 0                                                     | 0                                                    | $-\frac{e\chi \sin[2\alpha] \sin[t\omega]}{\sqrt{3}}$ |
| m = -1 | $-\frac{e\chi \cos[t\omega] \sin[2\alpha]}{\sqrt{6}}$ | $\frac{e\chi \sin[2\alpha] \sin[t\omega]}{\sqrt{6}}$ | 0                                                     |

Der Vektor  $D_{m=1}(t)$  rotiert in der x-y-Ebene im Gegenuhrzeigersinn um die z-Achse mit der Winkelgeschwindigkeit  $\omega$ .

Der Vektor  $D_{m=0}(t)$  oszilliert linear entlang der z-Achse mit der Winkelgeschwindigkeit  $\omega$ .

Der Vektor  $D_{m=-1}(t)$  rotiert in der x-y-Ebene im Uhrzeigersinn um die z-Achse mit der Winkelgeschwindigkeit  $\omega$ .

c)

Die zwei energetisch niedrigsten Wellenfunktionen (s. Übungsblatt 1.1) sind

$$\psi_1(x) = \sqrt{\frac{1}{a}} \cos\left(\frac{\pi x}{2a}\right) \text{ und } \psi_2(x) = \sqrt{\frac{1}{a}} \sin\left(\frac{\pi x}{a}\right)$$

Die Überlagerung ist  $\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_1(x) + \psi_2(x))$

Ohne Zeitentwicklung ist der Erwartungswert des Ortes:  $\int_{-a}^a dx \psi(x) x \psi(x) = \frac{32a}{9\pi^2}$

Da wir bereits wissen, dass die Zustände des Kastenpotentials orthogonal sind, lautet die Zeitentwicklung

$$\psi_1(x, t) = e^{-\frac{i}{\hbar} E_1 t} \psi_1(x), \text{ wobei } E_1 = \frac{\hbar^2 \pi^2}{8ma^2} \text{ ist. Ebenso gilt}$$

$$\psi_2(x, t) = e^{-\frac{i}{\hbar} E_2 t} \psi_2(x), \text{ mit } E_2 = \frac{\hbar^2 \pi^2}{4ma^2}.$$

Demnach entwickelt sich der Erwartungswert des Ortes mit der Zeit gemäß

$$\begin{aligned} \int_{-a}^a dx \psi(x, t) x \psi(x, t) &= \int_{-a}^a dx \frac{1}{2} \left( \sqrt{\frac{1}{a}} e^{-\frac{iE_1 t}{\hbar}} \cos\left(\frac{\pi x}{2a}\right) + \sqrt{\frac{1}{a}} e^{-\frac{iE_2 t}{\hbar}} \sin\left(\frac{\pi x}{a}\right) \right) x \left( \sqrt{\frac{1}{a}} e^{\frac{iE_1 t}{\hbar}} \cos\left(\frac{\pi x}{2a}\right) \right. \\ &\quad \left. + \sqrt{\frac{1}{a}} e^{\frac{iE_2 t}{\hbar}} \sin\left(\frac{\pi x}{a}\right) \right) = \frac{32a}{9\pi^2} \cos\left(\frac{(E_1 - E_2)t}{\hbar}\right) \end{aligned}$$

Der Erwartungswert des Ortes oszilliert mit einer Frequenz entsprechend des Energieunterschieds der zwei (untersten) Zustände. Bis auf einen konstanten Faktor (Ladung) ist die Rechenprozedur die gleiche wie die des oszillierenden Dipols.

## Aufgabe 2: Spin (6P)

Der halbzahlige Spin des Elektrons kann durch ein Zweizustandssystem beschrieben werden. Der „Spin up“-Zustand  $|\uparrow\rangle$  sei durch den zweikomponentigen Spinor  $\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$  charakterisiert, der „Spin down“-Zustand  $|\downarrow\rangle$  durch  $\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$ . Hier sei die z-Achse die Quantisierungsrichtung auf die wir die Orientierung des Spins beziehen\*. Den Vektorkomponenten des Spins werden die Matrixoperatoren  $\hat{S}_x, \hat{S}_y, \hat{S}_z$  zugeordnet, dem Betragsquadrat des Spinvektors der Operator  $\hat{S}^2$ .

$$\hat{S}_x = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \hat{S}_y = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \hat{S}_z = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad \hat{S}^2 = \hat{S}_x^2 + \hat{S}_y^2 + \hat{S}_z^2.$$

- Berechnen Sie die Eigenwerte von  $\hat{S}_z$  und  $\hat{S}^2$  für den Zustand  $|\uparrow\rangle$ .
- Nur die z-Komponente und der Betrag des Spins sind scharf messbar. Zeigen Sie dies durch Berechnung der Varianzen für die x-, y-, und z-Komponenten des Spins [z.B.  $\text{Var}(S_x) = \langle \hat{S}_x^2 \rangle - \langle \hat{S}_x \rangle^2$ ].
- Bestimmen Sie die Eigenwerte und Eigenzustände von  $\hat{S}_y$ . Welche Überlagerung aus den Zuständen  $|\uparrow\rangle$  und  $|\downarrow\rangle$  ergibt einen Spin in y-Richtung?  
Sie messen für einen Eigenzustand von  $\hat{S}_y$  die z-Komponente des Spins. Mit welchen Wahrscheinlichkeiten treten „Spin up“, bzw. „Spin down“ auf?
- Es gibt sog. Leiteroperatoren  $\hat{S}_+ = \hat{S}_x + i\hat{S}_y$  und  $\hat{S}_- = \hat{S}_x - i\hat{S}_y$ . Welche Zustände erhalten Sie, wenn Sie diese auf  $|\uparrow\rangle$  und  $|\downarrow\rangle$  anwenden?

\*Mathematisch bedeutet das, dass wir unsere Spinfunktionen in der Eigendarstellung der Matrix  $\hat{S}_z$  angeben.

## Lösung

$$\text{a) } \hat{S}_z |\uparrow\rangle = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2}.$$

$$\hat{S}^2 |\uparrow\rangle = (\hat{S}_x^2 + \hat{S}_y^2 + \hat{S}_z^2) \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = 3 \frac{\hbar^2}{4}$$

b)  $\hat{S}_x$  :

$$\langle \hat{S}_x \rangle = \frac{\hbar}{2} (1 \ 0) \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = 0$$

$$\langle \hat{S}_x^2 \rangle = \frac{\hbar^2}{4}$$

$$\text{var}(\hat{S}_x) = \langle \hat{S}_x^2 \rangle - \langle \hat{S}_x \rangle^2 = \frac{\hbar^2}{4} \neq 0$$

$\hat{S}_y$  :

$$\langle \hat{S}_y \rangle = \frac{\hbar}{2} (1 \ 0) \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = (1 \ 0) \begin{pmatrix} 0 \\ i \end{pmatrix} = 0$$

$$\langle \hat{S}_y^2 \rangle = \frac{\hbar^2}{4}$$

$$\text{var}(\hat{S}_y) = \langle \hat{S}_y^2 \rangle - \langle \hat{S}_y \rangle^2 = \frac{\hbar^2}{4} \neq 0$$

$\hat{S}_z :$

$$\langle \hat{S}_z \rangle = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2}$$

$$\langle \hat{S}_z^2 \rangle = \frac{\hbar^2}{4}$$

$$\text{var}(\hat{S}_z) = \langle \hat{S}_z^2 \rangle - \langle \hat{S}_z \rangle^2 = 0$$

➔ Nur die z-Komponente und der Betrag des Spins sind scharf messbar.

c)

Aus der Definition von Eigenwert und Eigenvektor ergibt sich:

$$\frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} = \lambda \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} \Rightarrow \begin{pmatrix} -i(\hbar/2)\beta \\ i(\hbar/2)\alpha \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \lambda\alpha \\ \lambda\beta \end{pmatrix}$$

Eigenwerte:

$$-i\frac{\hbar}{2}\beta = \lambda\alpha, \quad i\frac{\hbar}{2}\alpha = \lambda\beta \Rightarrow -i\frac{\hbar}{2}\beta = \lambda \left( \frac{2}{i\hbar} \lambda\beta \right) \Rightarrow \frac{\hbar^2}{4}\beta = \lambda^2\beta \Rightarrow \lambda_1 = +\frac{\hbar}{2}, \quad \lambda_2 = -\frac{\hbar}{2}$$

Aus dem positiven Eigenwert folgt:

$$-i\frac{\hbar}{2}\beta = \frac{\hbar}{2}\alpha \Rightarrow \beta = i\alpha \Rightarrow \chi_1 = \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \alpha \\ i\alpha \end{pmatrix}$$

Aus dem negativen Eigenwert folgt:

$$-i\frac{\hbar}{2}\beta = -\frac{\hbar}{2}\alpha \Rightarrow \beta = -i\alpha \Rightarrow \chi_2 = \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \alpha \\ -i\alpha \end{pmatrix}$$

Die Normierungsbedingung  $|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1$  ergibt  $\alpha = 1/\sqrt{2}$ . Daher sind die Eigenvektoren

$$\chi_1 = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ +i \end{pmatrix}, \quad \chi_2 = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -i \end{pmatrix}$$

Welche Überlagerung aus den Zuständen  $|\uparrow\rangle$  und  $|\downarrow\rangle$  ergibt einen Spin in y-Richtung?

$$\chi_1 = \frac{1}{\sqrt{2}} |\uparrow\rangle + \frac{i}{\sqrt{2}} |\downarrow\rangle$$

Die Wahrscheinlichkeit für Spin-up  $|\uparrow\rangle$  ist das Betragsquadrat des Koeffizienten in der Zustandsfunktion.

$$|\uparrow\rangle : w_{|\uparrow\rangle} = \left| \frac{1}{\sqrt{2}} \right|^2 = \frac{1}{2}$$

$$|\downarrow\rangle : w_{|\downarrow\rangle} = \left| \frac{i}{\sqrt{2}} \right|^2 = \frac{1}{2}$$

$$\text{d) } \hat{S}_+ |\uparrow\rangle = \hbar \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = 0$$

$$\hat{S}_+ |\downarrow\rangle = \hbar \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \hbar \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \hbar |\uparrow\rangle$$

$$\hat{S}_- |\uparrow\rangle = \hbar \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \hbar \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \hbar |\downarrow\rangle$$

$$\hat{S}_- |\downarrow\rangle = \hbar \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = 0$$

Wikipedia:

Die **Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren** sind der Kern einer möglichen Lösung der Schrödingergleichung des harmonischen Oszillators. Diese Operatoren können auch dazu benutzt werden, Probleme mit quantenmechanischem Drehimpuls einfacher zu lösen. Ferner finden die Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren Verwendung bei der Quantisierung von Feldern (der sogenannten zweiten Quantisierung oder Besetzungszahl-Darstellung).

Es gibt eine Vielzahl alternativer Bezeichnungen wie **Leiteroperatoren**, **Kletteroperatoren**, **Aufsteige-** und **Absteigeoperatoren** sowie **Hebe-** und **Senkoperatoren**. Statt „Erzeugungsoperator“ wird manchmal auch **Erschaffungsoperator** verwendet. Im deutschsprachigen Raum werden darüber hinaus auch die Operatoren  $\sigma_+$  und  $\sigma_-$ , die die Zustände eines Atoms ändern, als Erzeugungs- bzw. Vernichtungsoperatoren bezeichnet.

Das Problem des harmonischen Oszillators in der Quantenmechanik lässt sich mithilfe der Methode der Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren behandeln, die auch *algebraische Methode* genannt wird. Sie wurde hauptsächlich von Paul Dirac entwickelt. Für diesen Lösungsweg definiert man zwei Operatoren  $\hat{a}$  und  $\hat{a}^\dagger$ , die einem Oszillator jeweils ein Energiequant  $\hbar\omega$  entziehen oder hinzufügen. Deswegen werden sie Vernichtungs- und Erzeugungsoperator genannt.