5. Übung zur Vorlesung Atom- und Molekülphysik (E4) SS2021

Prof. H. Weinfurter, Dr. L. Knips

Aufgabe 15 (nur E4) **Lokalisierung und Energie**

Wir betrachten einen lokalisierten Zustand eines Elektrons in 3 Dimensionen, beschrieben durch die Wellenfunktion

$$\Psi(r) = \frac{2}{b^{\frac{3}{2}}} e^{-\frac{r}{b}}$$

mit einem Parameter b.

a) Wie stark ist das Elektron lokalisiert? Berechnen Sie dazu die Standardabweichung von $\hat{r}$.

b) Bestimmen Sie den Erwartungswert $\langle E_{\text{kin}} \rangle$ der kinetischen Energie.

c) Angenommen, dieses Elektron befindet sich im elektrostatischen Feld eines einfach positiv geladenen Kerns, welcher sich bei $r = 0$ befindet. Wie groß ist der Erwartungswert $\langle E_{\text{pot}} \rangle$ der potentiellen Energie?

d) Skizzieren Sie den Verlauf von $E = \langle E_{\text{kin}} \rangle + \langle E_{\text{pot}} \rangle$ in Abhängigkeit von b. Bestimmen Sie den Parameter b_{min}, bei welchem E minimal wird, und die dazugehörige Energie.

Aufgabe 16 **Dynamik im Wasserstoffatom**

Die Wellenfunktionen von drei Eigenzuständen im Wasserstoffatom sind gegeben durch

$$\begin{aligned}
\psi_{100}(r,\theta,\phi) &= \frac{1}{\sqrt{\pi}} \frac{1}{a_0^{\frac{3}{2}}} \cdot e^{-\frac{r}{a_0}}, \\
\psi_{210}(r,\theta,\phi) &= \frac{1}{4\sqrt{2}\sqrt{\pi}} \frac{1}{a_0^{\frac{5}{2}}} \cdot r \cdot e^{-\frac{r}{2a_0}} \cdot \cos(\theta), \\
\psi_{211}(r,\theta,\phi) &= \frac{1}{8\sqrt{\pi}} \frac{1}{a_0^{\frac{5}{2}}} \cdot r \cdot e^{-\frac{r}{2a_0}} \cdot \sin(\theta) e^{i\phi}.
\end{aligned}$$

Während der Erwartungswert des Ladungsschwerpunktes in den Eigenzuständen des Wasserstoffatoms zeitlich konstant ist, kann für Superpositionszustände eine Dynamik entstehen (siehe Aufgabe 11). Durch diese Bewegung des Ladungsträgers kann der atomare Zustand ähnlichem einem Hertz'schen Dipol an das Lichtfeld koppeln. Dazu betrachten wir nun die Superpositionszustände

$$\begin{aligned}
|\Psi_a(t)\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left(|\psi_{100}\rangle + e^{-i\omega t} |\psi_{210}\rangle \right), \\
|\Psi_b(t)\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left(|\psi_{100}\rangle + e^{-i\omega t} |\psi_{211}\rangle \right),
\end{aligned}$$

wobei $\omega = \omega_2 - \omega_1 = \frac{E_2 - E_1}{\hbar}$.
Berechnen Sie die zeitabhängigen Erwartungswerte $\langle \hat{x}(t) \rangle$, $\langle \hat{y}(t) \rangle$, $\langle \hat{z}(t) \rangle$ für diese beiden Zustände.

Aufgabe 17 Zweiniveau-Atom im Strahlungsfeld

Betrachten Sie die Evolution des Zustands eines Zweiniveau-Atoms, das mit einer zum atomaren Übergang resonanten klassischen elektromagnetischen Welle der Amplitude E_0 wechselwirkt. Der atomare Grundzustand sei $|1\rangle$, der angeregte Zustand $|2\rangle$, die Welle sei linear entlang der z-Achse polarisiert. In der sog. *Rotating-Wave-Approximation* kann der Hamiltonoperator als

$$\hat{H} = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & -\Omega_0 \\ -\Omega_0 & 0 \end{pmatrix}$$

geschrieben werden, wobei die Kopplungsstärke der Dipolwechselwirkung durch die Rabifrequenz $\Omega_0 := \frac{-eE_0}{\hbar}\langle 2|\hat{z}|1\rangle$ beschrieben wird.

a) Berechnen Sie die beiden Eigenenergien $\lambda_{1,2}$ sowie die zugehörigen Eigenzustände $|e_1\rangle$ und $|e_2\rangle$ in der Basis der atomaren Zustände $\{|1\rangle, |2\rangle\}$.

b) Geben Sie den Hamiltonoperator $\hat{H}$ in der Basis seiner Eigenzustände $|e_1\rangle$ und $|e_2\rangle$ an.

c) Das Atom sei zum Zeitpunkt $t = 0$ im angeregten Zustand: $|\psi(0)\rangle = |2\rangle$. Nun wird resonantes Laserlicht eingestrahlt. Zeigen Sie, dass die zeitliche Dynamik des Zustands durch

$$|\psi(t)\rangle = \cos\left(\frac{\Omega_0 t}{2}\right)|2\rangle + i\sin\left(\frac{\Omega_0 t}{2}\right)|1\rangle$$

gegeben ist. Skizzieren Sie die Besetzungswahrscheinlichkeit der beiden atomaren Niveaus $|1\rangle$ und $|2\rangle$ als Funktion der Zeit.
Hinweis: Stellen Sie den Anfangszustand $|2\rangle$ in der Basis der Eigenzustände von $\hat{H}$, d.h. in $|e_1\rangle$ und $|e_2\rangle$, dar.

d) In welchem Zustand befindet sich das Atom, wenn die Dauer der Wechselwirkung τ_p so gewählt wird, dass $\Omega_0 \cdot \tau_p = \pi$ gilt?

e) **(nur E4)** Wie ändern sich der Hamiltonoperator und seine Eigenwerte, wenn die Frequenz des Lichtfelds zum atomaren Übergang verstimmt ist? Welche Änderung ergibt sich *qualitativ* für die zeitliche Entwicklung der Besetzungswahrscheinlichkeiten von $|1\rangle$ und $|2\rangle$?