5. Übung zur Vorlesung Atom- und Molekülphysik (E4) SS2023

Achtung: Keine Übungen in der Pfingstwoche! Besprechung in der Woche vom 5.6.

Aufgabe 15 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 für die zeitliche Entwicklung der Besetzungswahrscheinlichkeiten von $|1\rangle$ und $|2\rangle$ im Vergleich zu Punkt c)?

f) **(nur E4)** Diskutieren Sie die Änderungen bei Berücksichtigung des spontanen Zerfalls. Wie lange müssen Sie warten, um ungefähr den stationären Bereich zu erreichen? Von welchen Parametern hängt diese Zeitdauer ab? ~~Wie ändern sich der Hamiltonoperator und seine Eigenwerte, wenn die Frequenz des Lichtfelds zum atomaren Übergang verstimmt ist? Welche Änderung ergibt sich für die zeitliche Entwicklung der Besetzungswahrscheinlichkeiten von~~ $\cancel{|1\rangle}$ ~~und~~ $\cancel{|2\rangle}$ ~~im Vergleich zu Punkt c)?~~

Aufgabe 16 **Optische Blochgleichungen und Darstellung von Zuständen auf der Blochkugel**

a) Bestimmen Sie die Komponenten u, v, w des Blochvektors $\vec{r}$ für die beiden Zustände $|\psi_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|1\rangle + |2\rangle)$ und $|\psi_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|1\rangle - i\,|2\rangle)$ und stellen Sie diese auf der Blochkugel graphisch dar. Benutzen Sie für die Darstellung (im mit ω_L rotierenden Koordinatensystem) den Fall ohne Verstimmung $\delta = 0$.
<u>Hinweis:</u> Diese Zustände sind im Bezugssystem, das mit der Übergangsfrequenz ω_{21} des Atoms rotiert, definiert und noch nicht im mit der Lichtfeldfrequenz ω_L rotierenden Koordinatensystem. Die Transformation aus Ersterem in Letzteres erfolgt über $\tilde{c}_1 = c_1 \cdot e^{-i\frac{\delta}{2}}$, $\tilde{c}_2 = c_2 \cdot e^{i\frac{\delta}{2}}$.
Ausgehend von der Dichtematrix $\tilde{\rho} = |\tilde{\psi}\rangle\langle\tilde{\psi}| = \begin{pmatrix} \tilde{c}_1 \\ \tilde{c}_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \tilde{c}_1^* & \tilde{c}_2^* \end{pmatrix}$ ist der Blochvektor $\vec{r}$ definiert als

$$\vec{r} := \begin{pmatrix} u \\ v \\ w \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2\Re(\tilde{\rho}_{12}) \\ 2\Im(\tilde{\rho}_{12}) \\ \tilde{\rho}_{22} - \tilde{\rho}_{11} \end{pmatrix}$$

b) Skizzieren Sie auf der Blochkugel die Evolution des Anfangszustands $|2\rangle$, wenn resonantes Licht mit Rabifrequenz Ω_0 eingestrahlt wird (siehe Aufg. 15) für das Zeitintervall $t = 0..\pi/\Omega_0$.

Hat der angeregten Zustand $|2\rangle$ eine endliche Lebensdauer, so dass dessen Besetzung mit der Rate γ in den Grundzustand zerfällt, und ist das Lichtfeld um die Frequenz δ verstimmt, folgt die zeitliche Entwicklung der Komponenten den Differentialgleichungen

$$\frac{d}{dt}u = -\frac{\gamma}{2}u + \delta v, \tag{1a}$$

$$\frac{d}{dt}v = -\delta u - \frac{\gamma}{2}v + \Omega_0 w, \tag{1b}$$

$$\frac{d}{dt}w = -\Omega_0 v - \gamma(w+1). \tag{1c}$$

c) Zeigen Sie, dass sich Gleichungen (1) für $\gamma = 0$ als

$$\frac{d}{dt}\vec{r} = \vec{r} \times \vec{\beta}$$

schreiben lassen und bestimmen Sie $\vec{\beta}$ und $\left|\vec{\beta}\right|$.

d) Skizzieren Sie für $\delta = 0$, $\gamma = 0$ (resonante Bestrahlung, unendliche Lebensdauer von $|2\rangle$) die Evolution der Ausgangszustände $|\psi_1\rangle$ und $|\psi_2\rangle$ auf der Blochkugel.

e) Beschreiben Sie den zeitlichen Verlauf von $\vec{r}(t)$ für allgemeines $\vec{\beta}$ bei $\gamma = 0$ auf der Blochkugel.

f) **(nur E4)** Skizzieren Sie die Besetzung des angeregten Zustandes $\tilde{\rho}_{22}$ für die Fälle $\gamma = \Omega_0/4$ und $\gamma = 2\Omega_0$ jeweils für $\delta = 0$ in einem sinnvollen Zeitintervall. Das System sei anfänglich im Grundzustand.

<u>Hinweis:</u> Verwenden Sie eine numerische Lösung, indem Sie das Problem mit genügend kleinen Zeitschritte diskretisieren oder auf entsprechende Funktionen (Python (odeint), Mathematica (NDSolve), Matlab, etc.) zurückgreifen.

g) **(nur E4)** Betrachten Sie nun den stationären Fall, d.h. $\frac{d}{dt}\vec{r} = 0$. Bestimmen Sie die Gleichgewichtslösung von w für allgemeine Ω_0, δ, γ.

Aufgabe 17 Auswahlregeln atomarer Dipolübergänge

Die Wechselwirkung von Licht in Form einer klassischen elektromagnetischen Welle, gegeben durch deren elektrisches Feld $\mathbf{E}(t) = \boldsymbol{\varepsilon} E_0 \sin(\omega t)$, mit einem Atom in Dipolnäherung wird durch den Wechselwirkungsoperator $\hat{H}' = -\hat{\mathbf{d}}\mathbf{E}(t)$ beschrieben. In Erweiterungen zu den Überlegungen aus der Vorlesung wird hier auch die Abhängigkeit von der Lichtpolarisation betrachtet. Ist das E-Feld entlang der z-Achse linear polarisiert, so vereinfacht sich der Wechselwirkungsoperator zu $\hat{H}' = -\hat{d}_z E(t) = e\hat{z}E(t)$, wobei $\hat{d}_z$ die z-Komponente des Dipoloperators ist. Die Kopplungsstärke eines elektrischen Dipolübergangs zwischen den Zuständen $|\psi_1\rangle$ und $|\psi_2\rangle$ wird hier also durch das Dipolmatrixelement $d_{21} = -e\langle\psi_2|\hat{z}|\psi_1\rangle$ bestimmt.

a) Berechnen Sie die Dipolmatrixelemente für folgende vier Übergänge im Wasserstoffatom:
$1s(n = 1, l = 0, m_l = 0) \to 2s(n = 2, l = 0, m_l = 0)$,
(nur E4): $1s(n = 1, l = 0, m_l = 0) \to 2p(n = 2, l = 1, m_l = 0, \pm 1)$.

Hinweis: Es werden nur Matrixelemente von $\hat{d}_z$ mit $z = r\cos(\theta)$ benötigt. Benutzen Sie Symmetrieüberlegungen zum Lösen der Integrale (analog zu Aufgabe 14).

b) Interpretieren Sie die Ergebnisse (z.B. in Verbindung mit Aufgabe 14).