Moderne Theoretische Physik II
(Quantenmechanik II und Statistik)

Institut für Theoretische Teilchenphysik

Prof. Dr. Matthias Steinhauser, Dr. Hantian Zhang, Manuel Egner **WS 23/24 – Blatt 02**

Abgabe: Fr., 03.11.2023, 11:00 Uhr; Besprechung: Di., 07.11.2023

---

1 (*) Zerfall eines Tritiumkerns (5 Punkte)

Ein Tritiumkern (^{3}H) verwandle sich durch β-Zerfall in einem Heliumkern (^{3}He). Berechnen Sie die Wahrscheinlichkeit, dass ein Elektron, das sich im Grundzustand des Tritiumatoms befand, im 2s-Zustand des Heliumatoms gefunden wird.

Solution

Der Zerfall wird in der "Sudden approximation" beschrieben. Der Grundzustand des Tritiums sei $|\Psi_1\rangle = |1S_{^3H}\rangle$, der 2s Zustand des Heliums sei $|\Psi_2\rangle = |2S_{^3He}\rangle$. Wir koennen die Wellenfunktion über den Radial- und Winkelanteil schreiben. Die Radialanteil für eine beliebiger Kernladungszahl Z ist gegeben mit (siehe Schwabl, Quantenmechanik, Seite 132)

$$R_{10}(r) = 2 * \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} \mathrm{e}^{-Zr/a_0}$$
$$R_{20}(r) = 2 * \left(\frac{Z}{2a_0}\right)^{3/2} \left(1 - \frac{Zr}{2a_0}\right) \mathrm{e}^{-Zr/(2a_0)}$$

Damit ergibt sich für Tritium

$$\langle x|\Psi_1\rangle = R_{10}(r)Y_{00}(\Theta,\phi) = 2\left(\frac{1}{a_0}\right)^{3/2} \mathrm{e}^{-r/a_0}\frac{1}{\sqrt{4\pi}}$$

und für Helium

$$\langle x|\Psi_2\rangle = R_{20}(r)Y_{00}(\Theta,\phi) = 2 * \left(\frac{1}{a_0}\right)^{3/2} \left(1 - \frac{r}{a_0}\right) \mathrm{e}^{-r/(a_0)}\frac{1}{\sqrt{4\pi}}$$

Die Übergangswahrscheinlichkeit kann berechnet werden mit

$$P_{\Psi_1\to\Psi_2} = |\langle\Psi_2|\Psi_1\rangle|^2,$$

wobei

$$\langle\Psi_2|\Psi_1\rangle = \int_0^\infty \mathrm{d}r\ r^2 \int \mathrm{d}\Omega\ \frac{1}{4\pi}\frac{4}{a_0^3}\mathrm{e}^{-2r/a_0}\left(1 - \frac{r}{a_0}\right) = -\frac{1}{2}.$$

Damit ergibt sich

$$P_{\Psi_1\to\Psi_2} = |\langle\Psi_2|\Psi_1\rangle|^2 = \frac{1}{4}.$$

2 (*) Magnetische Resonanz (5 Punkte)

Betrachten Sie ein Spin-1/2-Teilchen in einem Magnetfeld mit konstanter Komponente in z-Richtung und einer mit Frequenz ω in der xy-Ebene rotierenden Komponente. Der Hamilton-Operator für dieses System lautet:

$$\begin{aligned} H(t) &= H_0 + V(t)\,, \\ H_0 &= \omega_0 S_z\,, \\ V(t) &= \omega_1 \cos(\omega t) S_x + \omega_1 \sin(\omega t) S_y\,, \end{aligned}$$

wobei S_i mit $i = x, y, z$ die Komponenten des Spin-Operators bezeichnet.

1. [1pt.] Bestimmen Sie den Hamilton-Operator $H_I(t)$, der die Dynamik im Wechselwirkungsbild charakterisiert.

Solution

$$H_I(t) = \mathrm{e}^{iH_0 t/\hbar} V \mathrm{e}^{-iH_0 t/\hbar}$$

Wir können V schreiben als

$$V(t) = \omega_1 \cos(\omega t)\, S_x + \omega_1 \sin(\omega t)\, S_y = \frac{\omega_1 \hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & \mathrm{e}^{-i\omega t} \\ \mathrm{e}^{i\omega t} & 0 \end{pmatrix}$$

Unter Ausnutzen von $\sigma_z^2 = \mathbb{I}$ ergibt sich zudem

$$\begin{aligned} \mathrm{e}^{iH_0 t/\hbar} &= \mathbb{I} + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n!} \left(\frac{i\omega_0 \sigma_z t}{\hbar} \right)^n \\ &= \mathbb{I} + \mathbb{I} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-1)^n}{(2n)!} \left(\frac{\omega_0 t}{2} \right)^{(2n)} + i\sigma_z \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{(2n+1)!} \left(\frac{\omega_0 t}{2} \right)^{(2n+1)} \\ &= \begin{pmatrix} \mathrm{e}^{\frac{i\omega_0 t}{2}} & 0 \\ 0 & \mathrm{e}^{-\frac{i\omega_0 t}{2}} \end{pmatrix} \end{aligned}$$

Durch Matrixmultiplikation erhält man damit

$$H_I(t) = \frac{\omega_1 \hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & \mathrm{e}^{i(\omega_0 - \omega)t} \\ \mathrm{e}^{-i(\omega_0 - \omega)t} & 0 \end{pmatrix}$$

2. [2pt.] Bestimmen Sie den zeitabhängigen Erwartungswert $\langle \vec{S} \rangle(t)$ für den Fall $\omega = \omega_0$. Zum Zeitpunkt $t = 0$ befindet sich das System im Grundzustand von H_0.

Solution

This problem is exactly solvable, hence we start with general solution. We employ the following form of the spin operators:

$$S_x = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}0 & 1\\ 1 & 0\end{pmatrix}, \quad S_y = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}0 & -i\\ i & 0\end{pmatrix}, \quad S_z = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{pmatrix}$$

The Hamiltonian of this two-state problem takes the form

$$H(t) = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}\omega_0 & \omega_1 e^{-i\omega t}\\ \omega_1 e^{i\omega t} & -\omega_0\end{pmatrix}$$

The ket state takes the two-dimensional vector form

$$|\psi(t)\rangle = c_+(t)\,|+\rangle + c_-(t)\,|-\rangle = \begin{pmatrix}c_+(t)\\ c_-(t)\end{pmatrix}$$

where $c_\pm(t)$ are probablity amplitudes. Now the Schrödinger equation is

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial_t}\begin{pmatrix}c_+(t)\\ c_-(t)\end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}\omega_0 & \omega_1 e^{-i\omega t}\\ \omega_1 e^{i\omega t} & -\omega_0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}c_+(t)\\ c_-(t)\end{pmatrix}$$

Now we use

$$c_+(t) = e^{-i\frac{\omega}{2}t}f(t)\,, \quad c_-(t) = e^{i\frac{\omega}{2}t}g(t)$$

to obtain the following differential equations

$$\begin{aligned} i\frac{\partial}{\partial_t}f(t) + \frac{1}{2}\omega f(t) - \frac{1}{2}\omega_0 f(t) - \frac{1}{2}\omega_1 g(t) = 0\,,\\ i\frac{\partial}{\partial_t}g(t) - \frac{1}{2}\omega_1 f(t) - \frac{1}{2}\omega g(t) + \frac{1}{2}\omega_0 g(t) = 0\,. \end{aligned}$$

Now take second derivative in t on the first diff. eq. and substitute $f'(t)$ and $g'(t)$ from above, we have the second-order diff. eq.

$$\frac{\partial^2}{\partial^2 t}f(t) + \Omega^2 f(t)^2 = 0\,, \qquad \text{with } \Omega = \frac{1}{2}\sqrt{(\omega-\omega_0)^2 + \omega_1^2}\,.$$

Given the boundary condition $|c_+(0)| = 0$ and $|c_-(0)| = 1$ assuming the initial spin is aligned on the positive direction of z-axis, we can have the following solution

$$\begin{aligned} f(t) &= \frac{\omega_1}{2\Omega}\sin(\Omega t)\,,\\ g(t) &= \frac{\omega-\omega_0}{2\Omega}\sin(\Omega t) \;+\; i\cos(\Omega t) \end{aligned}$$

Now we can assemble $\langle\vec{S}\rangle = (\langle S_x\rangle, \langle S_y\rangle, \langle S_z\rangle)$ with $\omega = \omega_0$, which yields

$$\begin{aligned} \langle S_x\rangle &= \begin{pmatrix}c_+(t)\\ c_-(t)\end{pmatrix}^\dagger S_x \begin{pmatrix}c_+(t)\\ c_-(t)\end{pmatrix} = -\frac{\hbar}{2}\sin(\omega_0 t)\sin(\omega_1 t)\,,\\ \langle S_y\rangle &= \frac{\hbar}{2}\cos(\omega_0 t)\sin(\omega_1 t)\,,\\ \langle S_z\rangle &= -\frac{\hbar}{2}\cos(\omega_1 t)\,. \end{aligned}$$

3. [2pt.] Für die allgemeine Lösung der Schrödinger-Gleichung erweist es sich als vorteilhaft, eine andere Aufteilung des Hamilton-Operators zu wählen:

$$\begin{aligned} H(t) &= H_0' + V'(t)\,, \\ H_0' &= \omega S_z\,, \\ V'(t) &= (\omega_0 - \omega) S_z + V(t)\,. \end{aligned}$$

Im Wechselwirkungsbild lautet dann der Hamilton-Operator

$$V_I'(t) = e^{iH_0' t/\hbar} V'(t) e^{-iH_0' t/\hbar}\,.$$

Bestimmen Sie nun den Erwartungswert $\langle S_z \rangle(t)$ für beliebiges ω, wobei sich das System zum Zeitpunkt $t = 0$ wieder im Grundzustand von H_0 befindet.

Solution

In this case, the differential equations in the interactive picture are

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial_t} \begin{pmatrix} c_+(t) \\ c_-(t) \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} \omega_0 - \omega & \omega_1 e^{-i\omega t + i\omega t} \\ \omega_1 e^{i\omega t - i\omega t} & -\omega_0 + \omega \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_+(t) \\ c_-(t) \end{pmatrix}\,.$$

Now we take

$$c_+(t) = f(t)\,, \quad c_-(t) = g(t)\,,$$

and again we can get the exactly the same differential equations as before. Hence the solutions to $f(t)$ and $g(t)$ are the same as above again. The general solution for $\langle S_z \rangle$ is

$$\langle S_z \rangle = -\frac{\hbar}{8} \left(4\cos^2(\Omega t) + \frac{(\omega - \omega_0 - \omega_1)(\omega - \omega_0 + \omega_1)\sin^2(\Omega t)}{\Omega^2} \right)$$

3 Harmonischer Oszillator: zeitabhängige Störung

Betrachten Sie einen eindimensionalen harmonischen Oszillator mit dem Hamiltonoperator

$$H_0 = \frac{p_x^2}{2m} + \frac{m\omega^2 x^2}{2}\,,$$

der sich zum Zeitpunkt $t = 0$ in seinem Grundzustand befindet. Dieses System sei der zeitabhängigen Störung

$$H' = \begin{cases} 0 & t < 0 \text{ und } t > T \\ \lambda x\,(1 - t/T) & 0 \le t \le T \end{cases}$$

ausgesetzt.

1. Bestimmen Sie die Wahrscheinlichkeit, dass sich das System nach der Zeit $t > T$ im ersten angeregten Zustand befindet, bis zur ersten Ordnung in λ.

2. Betrachten Sie nun den Fall $\omega T \gg 1$. Zeigen Sie, dass die oben berechnete Wahrscheinlichkeit in diesem Limit dem Wert $|\langle \psi_1 | \psi_0' \rangle|^2$ entspricht, wobei $|\psi_0'\rangle$ dem Grundzustand des Hamiltonoperators $H_0 + \lambda x$ entspricht.

Solution

Im folgenden bezeichnet $|\psi\rangle$ die Wellenfunktion des ungestörten System, $|\psi'\rangle$ die des gestörten Systems. $|\psi_0\rangle$ bezeichnet den Grundzustand, $|\psi_1\rangle$ den ersten angeregten Zustand usw.

1. Die Korrektur zur Wellenfunktion in erster Ordnung Störungstheorie im Wechselwirkungsbild ist gegeben mit

$$|\psi'(t)\rangle_I^{(1)} = \int_0^t \frac{H_I'(t')}{i\hbar}|\psi(0)\rangle \mathrm{d}t'.$$

Einsetzen des Störungsterms ergibt

$$|\psi'(t)\rangle_I^{(1)} = \frac{\lambda}{i\hbar}\int_0^T \exp\left(\frac{iH_0t'}{\hbar}\right) x \exp\left(-\frac{iH_0t'}{\hbar}\right)|\psi(0)\rangle \mathrm{d}t'.$$

Der Ortsoperator kann über Auf- und Absteigeoperatoren ausgedrückt werden (sieh Aufgabenblatt 1)

$$x = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\left(a + a^\dagger\right).$$

Damit ergibt sich

$$|\psi'(t)\rangle_I^{(1)} = \frac{\lambda}{i\sqrt{2\hbar m\omega}}\int_0^T \left(1 - \frac{t'}{T}\right)\exp\left(i\omega t'\right)|\psi_1\rangle \mathrm{d}t'$$

Dieses Integral lässt sich mit partieller Integration lösen:

$$|\psi'(t)\rangle_I^{(1)} = \frac{\lambda}{\sqrt{2\hbar m\omega^3}}\left(1 + \frac{1 - \exp\left(i\omega T\right)}{i\omega T}\right)|\psi_1\rangle$$

Die Wahrscheinlichkeit, dass sich das System nach der Zeit t im Zustand $|\psi_1\rangle$ befindet, ist also

$$\begin{aligned}
P &= |\langle\psi_1|\psi'(t)\rangle|^2 \\
&= \left|\langle\psi_1|\exp\left(-\frac{iH_0t}{\hbar}\right)\left(|\psi'(t)\rangle_I^{(0)} + |\psi'(t)\rangle_I^{(1)}\rangle\right)\right|^2 + \mathcal{O}\left(\lambda^2\right) \\
&= \frac{\lambda^2}{2m\hbar\omega^3}\left|1 + \frac{1 - \exp\left(i\omega T\right)}{i\omega T}\right|^2.
\end{aligned}$$

Solution

2. Für den Fall $\omega T \gg 1$ ergibt sich für das Ergebnis der vorherigen Aufgabe

$$\lim_{\omega T \to \infty} = \frac{\lambda^2}{2m\hbar\omega^3}.$$

Da wir nun den Grundzustand des Hamiltonoperators mit der Störung λx betrachtetn wollen, können wir zur zeitunabhängigen Störungstheorie wechseln. In erster Ordnung zeitunabhängiger Störungstheorie lässt sich die Korrektur zum Grundzustand bestimmen mit

$$\begin{aligned}|\psi_0'\rangle &= |\psi_0\rangle + |\psi_1\rangle \frac{\langle\psi_1|\lambda x|\psi_0\rangle}{E_0 - E_1} \\ &= |\psi_0\rangle - \frac{\lambda}{\hbar\omega}\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}|\psi_1\rangle\end{aligned}$$

Dementsprechend ergibt sich

$$\langle\psi_1|\psi_0\rangle = \frac{-\lambda}{\sqrt{2\hbar m\omega^3}}$$

und damit

$$|\langle\psi_1|\psi_0\rangle|^2 = \frac{\lambda^2}{2\hbar m\omega^3},$$

was dem gesuchten Ergebnis entspricht.