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 03**

Abgabe: Fr., 10.11.2023, 11:00 Uhr; Besprechung: Di., 14.11.2023

---

1 (*) Fermis Goldene Regel (5 Punkte)

Ein Teilchen befinde sich in einem eindimensionalen Potential, beschrieben durch

$$V(x) = -V_0 \Theta(d/2 - |x|)\,,$$

wobei $V_0 > 0$. Der Potentialtopf sei so tief, dass die Grundzustandsenergie des Teilchens sehr klein ist im Vergleich zu der Energie, die es benötigen würde um den Potentialtopf zu verlassen: $\hbar^2\pi^2/(2md^2) \ll V_0$.

Betrachten Sie nun eine zeitabhängige Störung $H' = V\delta(x)\cos\omega t$ zu dem oben beschriebenen Potential. Bestimmen Sie die Übergangsrate vom Grundzustand in das Kontinuum aufgrund von H' in erster Ordnung zeitabhängiger Störungstheorie. Benutzen Sie dafür Fermis Goldene Regel.

Hinweis: Die Wellenfunktion für das Teilchen in einem unendlich tiefen Potentialtopf ist gegeben durch

$$|\phi_0(x)\rangle = \sqrt{\frac{2}{d}}\cos\left(\frac{\pi x}{d}\right)\,,$$

für $|x| \leq d/2$, was dem Anfangszustand entspricht. Im Kontinuum, dem Endzustand, gilt für die Wellenfunktion des Teilchens

$$|\psi_f(x)\rangle = \frac{1}{\sqrt{L}}\exp(ikx)\,,$$

wobei L eine Länge ist, die zur Normierung der Wellenfunktion eingeführt wird.

Solution

Considering that the potential box is deep enough that the lowest lying states sees the walls as infinitely high, the ground state is defined as:

$$|\phi_0(x)\rangle = \sqrt{\frac{2}{d}}\cos\left(\frac{\pi x}{d}\right) \quad \text{for}|x| \leq d/2, \quad \epsilon_0 = -V_0 + \frac{\hbar^2\pi^2}{2md^2}.$$

A delocalized state ($E > 0$) is characterized on the other hand by the continuous quantum number k, and is defined as:

$$|\psi_f(x)\rangle = \frac{1}{\sqrt{L}}e^{ikx}, \quad \epsilon_k = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}.$$

The transition rate between two such state is given by, according to Fermi's golden rule

$$\Gamma_{0,k} = \frac{2\pi}{\hbar}\frac{1}{4}\left|\langle\psi_f(x)|\, V\delta(x)\,|\phi_0(x)\rangle\right|^2 \left[\delta(\epsilon_f - \epsilon_0 - \hbar\omega) + \delta(\epsilon_f - \epsilon_0 + \hbar\omega)\right], \tag{1}$$

with the δ-functions imposing energy conservation via an absorption (first one) or emission process (second one). The scalar product, on the other hand, keeps into account the strength of the potential channel connecting the initial and end states.
As in our problem the initial state has less energy than the final one, only absorption processes will be relevant. The only energetically allowed transition is the one towards the delocalized states, where

$$\bar{k} = \sqrt{\frac{2m\omega}{\hbar} + \frac{\pi^2}{d^2} - \frac{2mV_0}{\hbar^2}}. \tag{2}$$

The total transition rates is given by the integral of $\Gamma_{0,k}$ over all possible final states, and therefore amounts to

$$\begin{aligned}
\Gamma_0 &= \int \frac{L}{2\pi}\mathrm{d}k\,\Gamma_{0,k}\\
&= \frac{L}{2\pi}\frac{m}{\hbar^2|\bar{k}|}\left(\Gamma_{0,+\bar{k}} + \Gamma_{0,-\bar{k}}\right)\\
&= \frac{L}{2\pi}\frac{2\pi}{\hbar}\frac{1}{4}\frac{2}{Ld}\frac{m}{\hbar^2|\bar{k}|}\left(\left|\int_{-d/2}^{d/2} e^{-i\bar{k}x}V\delta(x)\cos\left(\frac{\pi x}{d}\right)\mathrm{d}x\right|^2 + \left|\int_{-d/2}^{d/2} e^{+i\bar{k}x}V\delta(x)\cos\left(\frac{\pi x}{d}\right)\mathrm{d}x\right|^2\right)\\
&= \frac{V^2}{\hbar^3 d}\frac{m}{|\bar{k}|},
\end{aligned}$$

where in the first line the $\int \frac{L}{2\pi}\mathrm{d}k$ is the dimensionless integration measure to sum the final states.

2 (*) Zweizustandssystem mit zeitabhängiger Störung (5 Punkte)

Ein Zweizustandssystem im zeitlich harmonischen äußeren Potential wird durch folgenden Hamilton-Operator beschrieben

$$H = H_0 + V(t)\,,$$

wobei H_0 den ungestörten Hamilton-Operator bezeichnet:

$$H_0|1\rangle = E_1|1\rangle\,, \quad H_0|2\rangle = E_2|2\rangle\,, \quad \text{mit} \quad E_2 > E_1\,.$$

Der Störoperator im Raum der ungestörten Eigenzustände $\{|1\rangle, |2\rangle\}$ ist gegeben durch

$$V(t) = \lambda \begin{pmatrix} 0 & e^{i\omega t} \\ e^{-i\omega t} & 0 \end{pmatrix} .$$

1. [3pt.] Lösen Sie die zeitabhängige Schrödinger-Gleichung $i\hbar\partial|\Psi(t)\rangle/\partial t = H|\Psi(t)\rangle$ für die Anfangsbedingung $|\Psi(t=0)\rangle = |1\rangle$. Dabei erhalten Sie ein System von gekoppelten Differentialgleichungen für die Koeffizienten $c_n(t) = \langle n|\Psi(t)\rangle$, $n = 1, 2$, das exakt gelöst werden kann.

Solution

Similar to ex. 2 in sheet 2, in the interactive picture, the differential equations are

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial_t}\begin{pmatrix} c_1(t) \\ c_2(t) \end{pmatrix} = \lambda \begin{pmatrix} 0 & e^{i\omega t - i\omega_{21} t} \\ e^{-i\omega t + i\omega_{21} t} & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_1(t) \\ c_2(t) \end{pmatrix} .$$

where $\omega_{21} = \frac{E_2 - E_1}{\hbar}$. Now we perform the change of variables by

$$c_1(t) = e^{i\frac{\omega}{2}t - i\frac{\omega_{21}}{2}t} f(t) , \quad c_2(t) = e^{-i\frac{\omega}{2}t + i\frac{\omega_{21}}{2}t} g(t) ,$$

and we can get the exactly the same differential equations as before

$$i\frac{\partial}{\partial_t} f(t) + -\frac{1}{2}\hbar\omega f(t) + \frac{1}{2}\hbar\omega_{21} f(t) - \lambda g(t) = 0 ,$$
$$i\frac{\partial}{\partial_t} g(t) - \lambda f(t) + \frac{1}{2}\hbar\omega g(t) - \frac{1}{2}\hbar\omega_{21} g(t) = 0 .$$

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

$$\frac{\partial^2}{\partial^2 t} g(t) + \Omega^2 g(t)^2 = 0 , \qquad \text{with } \Omega = \frac{1}{2}\sqrt{\frac{4\lambda^2}{\hbar^2} + (\omega - \omega_{21})^2} .$$

The solution can be found as

$$g(t) = \frac{\lambda}{i\hbar\Omega} \sin(\Omega t) ,$$
$$f(t) = \frac{(\omega - \omega_{21})}{i2\Omega} \sin(\Omega t) + \cos(\Omega t) .$$

Hence we have

$$c_1(t) = e^{i\frac{\omega - \omega_{21}}{2}t} \left(\frac{\omega - \omega_{21}}{i2\Omega} \sin(\Omega t) + i\cos(\Omega t) \right) ,$$
$$c_2(t) = e^{-i\frac{\omega - \omega_{21}}{2}t} \left(\frac{\lambda}{i\hbar\Omega} \sin(\Omega t) \right) .$$

2. [2pt.] Benutzen Sie nun Störungstheorie in niederster, nicht-trivialer Ordnung, um die Koeffizienten $c_n(t)$, $n = 1, 2$, zu berechnen. Vergleichen Sie Ihr Ergebnis mit der exakten Lösung von Aufgabenteil 1 für kleine Werte von λ. Betrachten Sie dabei folgende Fälle separat:

   (a) $\omega \approx \omega_{21}$ mit $\omega_{21} = (E_2 - E_1)/\hbar$;

(b) $\omega \gg \omega_{21}$ bzw. $\omega \ll \omega_{21}$.

Solution

Now we use perturbation theory approach

$$c_n(t) = \delta_{n,1} + \frac{1}{i\hbar}\int_0^t dt' e^{i(E_n - E_1)t'/\hbar} \langle n|V(t')|1\rangle \,.$$

Hence we can have

$$\begin{aligned} c_1(t) &= 1\,, \\ c_2(t) &= \frac{1}{i\hbar}\int_0^t dt'\,\lambda\, e^{i\omega_{21}t' - i\omega t'} \;=\; \frac{\lambda\left(-1 + e^{it(\omega_{21}-\omega)}\right)}{\hbar(\omega - \omega_{21})}\,. \end{aligned}$$

In case (a) with $\lambda \ll 1$ and $\omega \sim \omega_{21}$, we have

$$c_1^{(\mathrm{pert})}(t) = 1\,, \quad c_2^{(\mathrm{pert})}(t) = \frac{\lambda t}{i\hbar}\,,$$

and from series expansion of exact solutions we have

$$c_1^{(\mathrm{exact})}(t) \approx 1 + \mathcal{O}(\lambda^2)\,, \quad c_2^{(\mathrm{exact})}(t) \approx \frac{\lambda t}{i\hbar} + \mathcal{O}(\lambda^2)$$

In case (b) with $\lambda \ll 1$ and $\omega_{21} \ll \omega$, we have

$$c_1^{(\mathrm{pert})}(t) = 1\,, \quad c_2^{(\mathrm{pert})}(t) = \frac{\lambda\left(-1 + e^{-it\omega}\right)}{\hbar(\omega)}\,,$$

and from series expansion of exact solutions we have

$$c_1^{(\mathrm{exact})}(t) \approx 1 + \mathcal{O}(\lambda^2)\,, \quad c_2^{(\mathrm{exact})}(t) \approx \frac{\lambda\left(-1 + e^{-it\omega}\right)}{\hbar(\omega)} + \mathcal{O}(\lambda^2)$$

The other case $\omega \ll \omega_{21}$ is similar, and we do not show explicitly.

3 Kommutatorrelationen

Überprüfen Sie die Kommutatorrelation für den Drehimpulsoperator $\vec{L}$ und den Ortsoperator $\vec{r}$

$$[\vec{L}^2, [\vec{L}^2, \vec{r}\,]\,] = 2\hbar^2\{\vec{L}^2, \vec{r}\,\}\,.$$

Berechnen Sie dazu die Kommutatoren $[\vec{L}^2, x_i]$, wobei x_i eine Komponente des Ortsoperators bezeichnet.

Solution

We start with the commutation relation

$$[L_m, x_i] = \epsilon_{mjk} x_j [p_k, x_i] = -i\hbar\epsilon_{mji} x_j = i\hbar\epsilon_{mij} x_j \,,$$

and we have

$$\begin{aligned}[\vec{L}^2, x_i] &= [L_m, x_i] L_m + L_m [L_m, x_i] \\ &= i\hbar\epsilon_{mij}(x_j L_m + L_m x_j) = i\hbar\epsilon_{mij}\{L_m, x_j\} \,,\end{aligned}$$

where $\{a, b\} = ab + ba$ is the anti-commutator. We can use $[L_a, L_b] = i\hbar\epsilon_{abc} L_c$ to evaluate

$$\begin{aligned}[L_n, \{L_m, x_j\}] &= L_m [L_n, x_j] + [L_n, L_m] x_j + x_j [L_n, L_m] + [L_n, x_j] L_m \\ &= i\hbar\Big(\epsilon_{njk}\{L_m, x_k\} + \epsilon_{nmk}\{L_k, x_j\}\Big) \,.\end{aligned}$$

Then we can have

$$\begin{aligned}\Big[\vec{L}^2, [\vec{L}^2, x_i]\Big] &= i\hbar\epsilon_{mij}\Bigg(L_n\Big[L_n, \{L_m, x_j\}\Big] + \Big[L_n, \{L_m, x_j\}\Big] L_n\Bigg) \\ &= -\hbar^2\Big(L_i\{L_k, x_k\} - L_n\{L_n, x_i\} + L_n\{L_i, x_n\} - L_i\{L_k, x_k\} \\ &\quad + \{L_k, x_k\} L_i - \{L_n, x_i\} L_n + \{L_i, x_n\} L_n - \{L_k, x_k\} L_i\Big) \,,\end{aligned}$$

by using

$$\begin{aligned}\epsilon_{mij}\epsilon_{njk} &= \epsilon_{jmi}\epsilon_{jkn} = \delta_{mk}\delta_{in} - \delta_{mn}\delta_{ik} \,, \\ \epsilon_{mij}\epsilon_{nmk} &= \epsilon_{mij}\epsilon_{mkn} = \delta_{ik}\delta_{jn} - \delta_{in}\delta_{jk} \,.\end{aligned}$$

Now we can further use the followings

$$\begin{aligned}L_m x_m &= \epsilon_{mjk} x_m x_j p_k = 0 \,, \\ L_m x_i L_m &= [L_m, x_i] L_m + x_i L_m^2 = L_m [x_i, L_m] + L_m^2 x_i \\ [L_i, x_m] &= i\hbar\epsilon_{imj} x_j = -i\hbar\epsilon_{mij} x_j = [x_i, L_m] \,,\end{aligned}$$

to obtain the final relation

$$\begin{aligned}\Big[\vec{L}^2, [\vec{L}^2, x_i]\Big] &= -\hbar^2\Big(- L_n\{L_n, x_i\} + L_n\{L_i, x_n\} - \{L_n, x_i\} L_n + \{L_i, x_n\} L_n\Big) \\ &= -\hbar^2\Big((-2\{L_n^2, x_i\} - L_n[L_i, x_n] - [x_n, L_i] L_n + L_n L_i x_n + x_n L_i L_n\Big) \\ &= 2\hbar^2\{L_n^2, x_i\}\end{aligned}$$