KARLSRUHER INSTITUT FÜR TECHNOLOGIE

INSTITUT FÜR THEORIE DER KONDENSIERTEN MATERIE

Moderne Theoretische Physik II (WS 2024/25)

Prof. Dr. A. Shnirman

Adrian Reich

Lösungen zu Blatt 2

Besprechung 12.11.2024

---

1. **Wasserstoffatom im elektrischen Feld** **(7 Punkte)**

Betrachten Sie ein Wasserstoffatom, beschrieben durch den Hamiltonoperator H_0, in einem homogenen, zeitabhängigen elektrischen Feld, das in z-Richtung ausgerichtet sei mit $\vec{\mathcal{E}}(t) = \mathcal{E}(t)\hat{e}_z$ und

$$\mathcal{E}(t) = \frac{A\tau}{\tau^2 + t^2}, \tag{1}$$

wobei A und τ Konstanten sind. Der gesamte Hamiltonoperator lautet damit

$$H(t) = H_0 + e\mathcal{E}(t)z. \tag{2}$$

Das Elektron des Wasserstoffatoms befinde sich für $t \to -\infty$ im Grundzustand ($n = 1$, $l = m = 0$). Berechnen Sie die Wahrscheinlichkeit, dass es für $t \to \infty$ in den angeregten Zustand mit $n = 2$, $l = 1$ und $m = 0$ übergeht in erster Ordnung Störungstheorie.

Hinweis:

$$\int_{-\infty}^{\infty} dt\ \frac{\tau e^{i\omega t}}{\tau^2 + t^2} = \pi e^{-|\omega|\tau} \tag{3}$$

Lösungsvorschlag

Zur Erinnerung: Die Eigenenergien des Wasserstoffproblems lauten $E_n = -R_y/n^2$, mit der Rydberg-Energie R_y und $n = 1, 2, \ldots$. Der n-te Eigenzustand ist n^2-fach entartet. Wir wählen $\{H_0, \vec{L}^2, L_z\}$ als vollständiges System kommutierender Observablen, wobei $\vec{L}$ der Drehimpulsoperator ist. Die Eigenzustände $|n, l, m\rangle$ sind dann eindeutig charakterisiert durch die Hauptquantenzahl n, die Drehimpulsquantenzahl l und die magnetischen Quantenzahl m, wobei $\vec{L}^2 |n, l, m\rangle = \hbar^2 l(l+1) |n, l, m\rangle$ und $L_z |n, l, m\rangle = \hbar m |n, l, m\rangle$. Es gilt $l, m \in \mathbb{Z}$ mit $0 \le l < n$ und $-l \le m \le l$.

Wir folgen dem Vorgehen von Blatt 1, Aufgabe 3, und finden für die Übergangswahrscheinlichkeit

$$P_{100\to 210} = \left| \langle 210|100\rangle - \frac{ie}{\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} dt\, \mathcal{E}(t)\, \langle 210| e^{iH_0 t/\hbar} z e^{-iH_0 t/\hbar} |100\rangle \right|^2 \tag{4}$$

$$= \frac{e^2 A^2}{\hbar^2} \left| \int_{-\infty}^{\infty} dt\ \frac{\tau e^{i(E_2 - E_1)t/\hbar}}{\tau^2 + t^2}\, \langle 210|z|100\rangle \right|^2 \tag{5}$$

Das Integral lässt sich mit der in der Aufgabenstellung gegebenen Formel berechnen. Für das Matrixelement nutzen wir die bekannte Form (siehe z.B. Wikipedia) der Wasserstoff-Eigenfunktionen im Ortsraum in Kugelkoordinaten

$$\langle \vec{r}|nlm\rangle = R_{nl}(r) Y_{lm}(\theta, \varphi), \tag{6}$$

wobei

$$R_{10}(r) = 2a_0^{-3/2} e^{-r/a_0}, \quad R_{21}(r) = (2a_0)^{-3/2}(r/\sqrt{3}a_0)e^{-r/2a_0}, \tag{7}$$

$$Y_{00}(\theta,\varphi) = \sqrt{1/4\pi}, \quad Y_{10}(\theta,\varphi) = \sqrt{3/4\pi}\cos\theta, \tag{8}$$

mit dem bohrschen Radius a_0. Zudem wissen wir in Kugelkoordinaten $z = r\cos\theta$ und finden damit

$$\langle 210|z|100\rangle = \frac{1}{4\pi}\frac{a_0}{\sqrt{2}}\int_0^\infty d\rho \int_0^{2\pi} d\varphi \int_{-1}^{1} d\cos\theta\, \rho^4 e^{-3\rho/2}\cos^2\theta \tag{9}$$

$$= \frac{1}{4\pi}\frac{a_0}{\sqrt{2}}\frac{2^8}{3^4}\frac{4\pi}{3} \approx \frac{3a_0}{4}. \tag{10}$$

Damit lautet die Übergangswahrscheinlichkeit also

$$P_{100\to 210} \approx \frac{9\pi^2}{16}\frac{e^2A^2a_0^2}{\hbar^2}e^{-3R_y\tau/2\hbar}. \tag{11}$$

τ charakterisiert die Zeitskala, auf der das elektrische Feld ein- und ausgeschaltet wird. Wir sehen also, dass dieser Prozess schnell auf der Skala, die durch die Anregungsenergie definiert ist, stattfinden muss, $\tau \lesssim \hbar R_y^{-1}$, damit es eine siginifikant von Null verschiedene Übergangswahrscheinlichkeit gibt.

2. Zustandsdichte **(5 Punkte)**

Um Probleme zu beschreiben, bei denen die erlaubten Energieniveaus sehr eng beieinander liegen (Kontinuum), ist es sehr oft hilfreich, das Konzept der Zustandsdichte $\nu(E)$ einzuführen. Dabei ist $\nu(E)dE$ definiert als die Anzahl der Energieniveaus, die in einem Energieintervall $[E, E + dE]$ liegen. In dieser Aufgabe leiten wir die Zustandsdichte für ein freies Teilchen her, das in einem eindimensionalen Intervall der Länge L gefangen ist. Der Hamiltonoperator laute also

$$H = \frac{p^2}{2m} + V(x), \qquad V(x) = \begin{cases} 0, & |x| < L/2, \\ \infty, & |x| > L/2. \end{cases} \tag{12}$$

a) Geben Sie die Quantisierungsbedingung und einen allgemeinen Ausdruck für die erlaubten Energieniveaus E_n an. (2 Punkte)

b) Im Kontinuumslimes $L \to \infty$ werden die Abstände zwischen zwei benachbarten Energieniveaus beliebig klein und wir können E_n als eine kontinuierliche Funktion behandeln. Begründen Sie, dass $\nu(E) = \frac{dn}{dE}$ und finden Sie damit

$$\nu(E) = \frac{L}{2\pi\hbar}\sqrt{\frac{2m}{E}}. \qquad \text{(3 Punkte)} \tag{13}$$

Lösungsvorschlag

a) Die Eigenfunktionen sind proportional zu $\sin(kx)$ bzw. $\cos(kx)$ und müssen bei $x = \pm L/2$ verschwinden. Daraus folgt für die erlaubten k-Werte

$$k_n = \frac{\pi n}{L}, \qquad n = 1, 2, 3, \ldots \tag{14}$$

Die Energieniveaus lauten also

$$E_n = \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m} = \frac{\hbar^2}{2m}\frac{\pi^2 n^2}{L^2}. \tag{15}$$

b) Wir sehen, dass der Abstand zwischen benachbarten Energiewerten proportional zu L^{-2} ist. Für $L \to \infty$ gehen wir also von einem diskreten zu einem kontinuierlichen Spektrum über. Um die Anzahl der Energieniveaus $\nu(E)\Delta E$ in einem Intervall ΔE zu finden, stellen wir obige Gleichung nach $n(E)$ um und berechnen

$$\nu(E)\Delta E = n(E + \Delta E) - n(E). \tag{16}$$

Im Limes infinitesimal kleiner Intervalle $\Delta E \to 0$ folgt damit gerade der Differenzenquotient

$$\nu(E) = \frac{n(E + \Delta E) - n(E)}{\Delta E} \longrightarrow \frac{dn}{dE}, \tag{17}$$

im betrachteten Fall also

$$\nu(E) = \frac{L}{\pi\hbar}\frac{d}{dE}\sqrt{2mE} = \frac{L}{2\pi\hbar}\sqrt{\frac{2m}{E}} \tag{18}$$

3. Geladenes Teilchen im Delta-Potential (8 Punkte)

Als einfaches Modell für den photoelektrischen Effekt betrachten wir Teilchen in einem eindimensionalen Delta-Potential mit $H = -\frac{\hbar^2}{2m}\partial_x^2 - \alpha\,\delta(x)$, wobei $\alpha > 0$. Die Eigenzustände lassen sich einteilen in einen gebundenen Zustand mit Wellenfunktion und Energie gegeben durch

$$\psi_0(x) = \sqrt{\frac{m\alpha}{\hbar^2}}e^{-\frac{m\alpha}{\hbar^2}|x|}, \quad E_0 = -\frac{m\alpha^2}{2\hbar^2}, \tag{19}$$

sowie zwei Streuzuständen pro Energie $E \geq 0$ im Kontinuum. Die Wellenfunktionen der von links einlaufenden Streuzustände, können wie folgt geschrieben werden

$$\phi_k(x) = \frac{1}{\sqrt{L}}\begin{cases} e^{ikx} - \frac{1}{1+i\hbar^2 k/m\alpha}e^{-ikx}, & x < 0, \\ \frac{i\hbar^2 k/m\alpha}{1+i\hbar^2 k/m\alpha}e^{ikx}, & x > 0, \end{cases} \tag{20}$$

wobei die zugehörige Energie gegeben ist durch $E(k) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$ und wir die einfallende Welle auf ein Teilchen pro Länge L normiert haben. (Betrachten Sie diese Wahl der Normierung hier als postuliert.)

a) Berechnen Sie das Matrixelement $\langle\psi_0|x|\phi_k\rangle$ des Ortsoperators. Sie sollten ein Ergebnis der Form

$$\langle\psi_0|x|\phi_k\rangle \propto \frac{k}{(c_1 k^2 + c_2)^2} \tag{21}$$

erhalten. (3 Punkte)

Nehmen wir nun an, das Teilchen befinde sich im gebundenen Zustand $|\psi_0\rangle$ und trage eine elektrische Ladung q. Zum Zeitpunkt $t = 0$ werde ein oszillierendes elektrisches Feld mit Amplitude $\mathcal{E}$ eingeschaltet, das ein zeitabhängiges Störpotential

$$V(t) = -q\mathcal{E}x\cos\omega t \tag{22}$$

erzeugt. Wir möchten im Folgenden Fermis Goldene Regel benutzen, um die totale Rate zu bestimmen, mit der Teilchen aus dem gebundenen Zustand $|\psi_0\rangle$ ins Kontinuum übergehen.

b) Geben Sie zunächst die Rate an, mit der Teilchen aus dem gebundenen Zustand $|\psi_0\rangle$ in **einen** der ungebundenen Zustände $|\phi_k\rangle$ übergehen. Nutzen Sie dabei die Ersetzung $\frac{\sin^2(\omega t/2)}{(\omega/2)^2} \to 2\pi\delta(\omega)t$. (2 Punkte)

c) Summieren Sie Ihr Ergebnis aus Aufgabenteil b) über alle möglichen Endzustände, um die totale Rate zu erhalten. Verwenden Sie hierzu entweder die Zustandsdichte aus Aufgabe 2 oder führen Sie die diskrete Summe $\sum_k$ in ein Integral $\int dk$ über. Benutzen Sie dabei, motiviert durch Aufgabe 2, dass der Abstand Δk zwischen benachbarten k-Werten $\Delta k = \pi/L$ beträgt. (3 Punkte)

Lösungsvorschlag

a) Wir erhalten für das gesuchte Matrixelement

$$\begin{aligned}
\langle\psi_0|x|\phi_k\rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} dx\, x\, \psi_0^\dagger(x)\phi_k(x) && (23)\\
&= \sqrt{\frac{m\alpha}{\hbar^2 L}} \left[\int_{-\infty}^{0} dx\, x \left(e^{\left(\frac{m\alpha}{\hbar^2}+ik\right)x} - \frac{1}{1+i\hbar^2 k/m\alpha} e^{\left(\frac{m\alpha}{\hbar^2}-ik\right)x}\right)\right. && (24)\\
&\qquad \left. + \frac{i\hbar^2 k/m\alpha}{1+i\hbar^2 k/m\alpha} \int_0^{\infty} dx\, x\, e^{-\left(\frac{m\alpha}{\hbar^2}-ik\right)x}\right] && (25)\\
&= \frac{4i\hbar^3}{\sqrt{\xi^3 L}} \frac{\hbar k}{(\hbar^2 k^2 + m\alpha/\xi)^2}, && (26)
\end{aligned}$$

wobei wir die Längenskala $\xi \equiv \hbar^2/m\alpha$ definiert haben.

b) In der Vorlesung haben wir gesehen, dass für eine harmonische Störung der Frequenz ω, die Übergangswahrscheinlichkeit von einem Zustand $|n\rangle$ in einen Zustand $|m\rangle$ (in erster Ordnung Störungstheorie) gegeben ist durch

$$P_{n\to m} \approx \frac{1}{\hbar^2}\frac{|V_{mn}|^2}{4}\left[\frac{\sin^2(\omega_{mn}+\omega)t/2}{(\omega_{mn}+\omega)^2/4} + \frac{\sin^2(\omega_{mn}-\omega)t/2}{(\omega_{mn}-\omega)^2/4}\right], \tag{27}$$

wobei $\omega_{mn} = (E_m - E_n)/\hbar$ und V_{mn} das Störmatrixelement zwischen den beiden Zuständen ist. Mit der gegebenen Ersetzung der Sinus-Ausdrücke durch Delta-Funktionen, erhalten wir die Rate

$$\Gamma_{n\to m} = \frac{P_{n\to m}}{t} = \frac{2\pi}{\hbar^2}\frac{|V_{mn}|^2}{4}\left(\delta(\omega_{mn}+\omega) + \delta(\omega_{mn}-\omega)\right). \tag{28}$$

In unserem Fall gilt damit

$$\Gamma_{0\to k} = \frac{8\pi\hbar^4 q^2 \mathcal{E}^2}{\xi^3 L}\frac{\hbar^2 k^2}{(\hbar^2 k^2 + m\alpha/\xi)^4}\left[\delta((E(k)-E_0)/\hbar + \omega) + \delta((E(k)-E_0)/\hbar - \omega)\right]. \tag{29}$$

c) Die gesamte Rate, mit der durch die Störung $V(t)$ Teilchen aus dem gebundenen in einen der ungebundenenen Zustände übergehen, ist also

$$\Gamma_{0\to} = \sum_k \Gamma_{0\to k}. \tag{30}$$

Im Limes eines unendlich großen Systems können wir, wie in Aufgabe 2 motiviert, ein Kontinuum von k-Werten annehmen und die Summe in ein Integral überführen. Wir schreiben dafür

$$\sum_k f_k = \frac{1}{\Delta k}\sum_k f_k\, \Delta k \longrightarrow \frac{L}{\pi}\int f(k)dk \tag{31}$$

und damit

$$\Gamma_{0\to} = \frac{8\pi\hbar^4 q^2\mathcal{E}^2}{\xi^3 L}\frac{L}{\pi}\int_{-\infty}^{\infty} dk\,\frac{\hbar^2k^2}{(\hbar^2k^2+m\alpha/\xi)^4}[\delta((E(k)-E_0)/\hbar+\omega) \tag{32}$$

$$+\delta((E(k)-E_0)/\hbar-\omega)]. \tag{33}$$

Es ist $(E(k)-E_0)\hbar = \frac{\hbar k^2}{2m}+\frac{m\alpha^2}{2\hbar^3} > 0$, womit das Argument der ersten δ-Funktion nie Null wird und dieser Term verschwindet. Das Argument der zweiten δ-Funktion kann nur Null werden, falls $\hbar\omega > |E_0|$, wovon wir im Folgenden ausgehen, andernfalls $\Gamma_{0\to} = 0$ aufgrund der Energieerhaltung. Es bleibt damit

$$\Gamma_{0\to} = \frac{8\pi\hbar^4 q^2\mathcal{E}^2}{\xi^3 L}\frac{L}{\pi}\int_{-\infty}^{\infty} dk\,\frac{\hbar^2k^2}{(\hbar^2k^2+m\alpha/\xi)^4}\delta\left(\frac{\hbar k^2}{2m}+\frac{m\alpha^2}{2\hbar^3}-\omega\right) \tag{34}$$

$$= 2\times\frac{8\hbar^4q^2\mathcal{E}^2}{\xi^3}\left[\frac{m}{\hbar|k|}\frac{\hbar^2k^2}{(\hbar^2k^2+m\alpha/\xi)^4}\right]_{k\to\sqrt{\frac{2m\omega}{\hbar}-\xi^{-2}}} \tag{35}$$

$$= 8q^2\mathcal{E}^2\frac{\hbar|E_0|^{3/2}}{m}\frac{\sqrt{\hbar\omega-|E_0|}}{(\hbar\omega-|E_0|+\alpha/2\xi)^4}. \tag{36}$$

Eine andere Möglichkeit wäre gewesen, mithilfe der Zustandsdichte $\nu(E)$ das Integral über alle Energien des Kontinuums zu berechnen

$$\Gamma_{0\to} = 2\int_0^{\infty} dE\,\nu(E)\Gamma_{0\to k(E)}, \tag{37}$$

wobei der Faktor 2 berücksichtigt, dass es 2 Streuzustände pro Energie gibt. Dass dies das gleiche Ergebnis liefert wie obige Rechnung, sehen wir, indem wir das Integral über k folgendermaßen umformen

$$\frac{L}{\pi}\int_{-\infty}^{\infty} dk\,\Gamma_{0\to k} = 2\frac{L}{\pi}\int_0^{\infty} dk\,\Gamma_{0\to k} = 2\frac{L}{\pi}\int_0^{\infty} dE\,\left(\frac{dk}{dE}\right)\Gamma_{0\to k(E)} \tag{38}$$

$$= 2\int_0^{\infty} dE\,\frac{L}{2\pi\hbar}\sqrt{\frac{2m}{E}}\,\Gamma_{0\to k(E)} = 2\int_0^{\infty} dE\,\nu(E)\,\Gamma_{0\to k(E)}. \tag{39}$$