

3.1.2. Zeitabhängige Störungen

$\underline{V} = \underline{V}(t)$ sei zeitabhängig

Koeffizienten-gleichung aus $|k\rangle = \sum_n c_n |n\rangle$

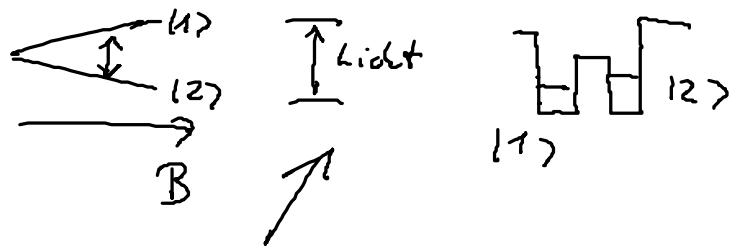
$$\dot{c}_1 = -i\omega_1 c_1 - i\Omega_{12} c_2$$

$$\dot{c}_2 = -i\omega_2 c_2 - i\Omega_{21} c_1$$

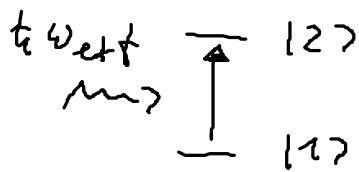
$$\omega_i = \frac{\epsilon_i + V_{ii}(t)}{\hbar} \quad , \quad \frac{V_{ij}(t)}{\hbar} = \Omega_{ij} \quad (i \neq j)$$

dieses Gleichungssystem kann für beliebige ZNS
angewendet werden (noch keine Näherung)

Anwendungen: NMR, Optik, Transport v. Elektronen



(i) wird oft angewendet wenn eine Störung vorliegt mit Frequenz Wert $\approx \frac{E_2 - E_1}{\hbar}$



← ausserhalb offener Niveaus

mitrechnen \rightarrow Resonanznäherung

(Rotating Wave

Approximation RWA)

(ii) Bei entartetem System $\omega_1 = \omega_2$ wird Entartung aufgehoben, exakte Lösung ist mögl!
ergibt sich als Grenzfall von (i)

(i) externe Störung $\Omega_{ii} = 0$

$\Omega_{ij} \neq 0$ ($i \neq j$)

z.B. bei Optik, Absorption von em. Wellen

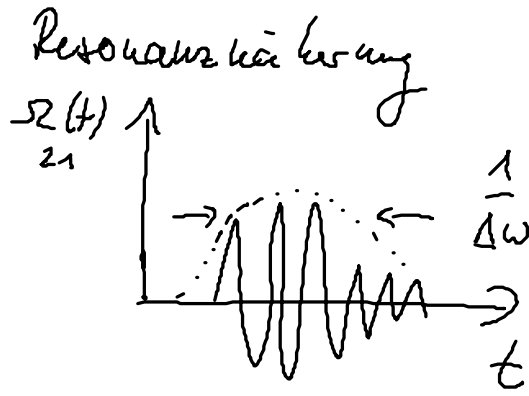
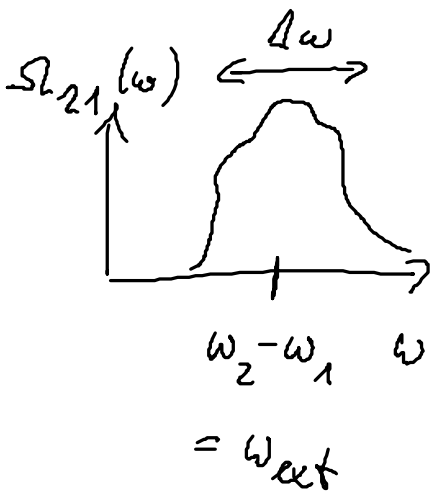
(später berechnen von $V_{ii} = 0$ f. Spezialfall)

$$c_i(t) = \underset{t=0}{c_i} e^{-i\omega_i t}$$

$$\Omega_{21}(t) = \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega \Omega_{21}(\omega) e^{-i\omega t}$$

Fourierdarstellung der zeitabhängigen Störung

$$\dot{\tilde{c}}_2(t) = -i \tilde{c}_1(t) \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega \underbrace{\Omega_{21}(\omega)} e^{-i\omega t} e^{-i(\omega_1 - \omega_2)t}$$



$$\begin{aligned} \Omega_{21}(\omega) &\sim f(\omega - (\omega_2 - \omega_1)) \\ &\sim e^{-\frac{(\omega - \omega_{21})^2}{\Delta\omega^2}} \\ \omega_2 - \omega_1 &= \omega_{21} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \dot{\tilde{c}}_2(t) &= -i \tilde{c}_1(t) \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega f(\omega - \omega_{21}) e^{-i\omega t} e^{+i\omega_{21} t} \\ &= -i \tilde{c}_1(t) \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega f(\omega - \omega_{21}) e^{-i(\omega - \omega_{21})t} \end{aligned}$$

$$\tilde{\Omega}_{21}(t)$$



langsame Einhüllende des Pulses

$$\dot{\tilde{c}}_2(t) = -i \tilde{c}_1(t) \tilde{\Omega}_{21}(t)$$

$\sim \hat{=}$ Einbettende ...

analoge Ableitung:

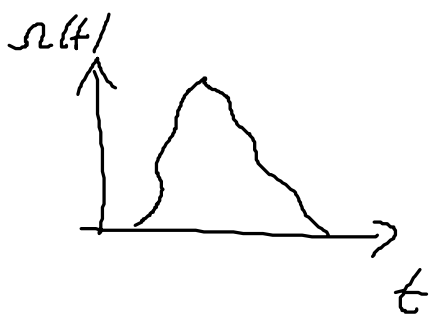
$$\dot{\tilde{c}}_1(t) = -i \tilde{c}_2(t) \tilde{\Omega}_{12}(t)$$

hsg. zwei gekoppelte Dgl.:

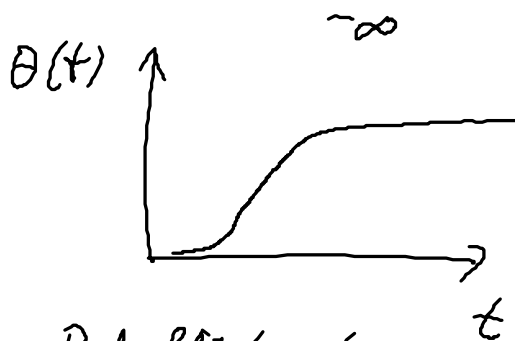
$$\Omega_{21} = \Omega_{12} = \Omega(t) \text{ reell}$$

Annahme, kann immer realisiert werden

neue Koordinate: $\Theta(t) = \int_{-\infty}^t \Omega(t') dt'$



Puls der
Störung



Pulsfläche der
Störung Θ

$$d\Theta = \Omega(t) dt \quad \partial_{\Theta} = '$$

$$\tilde{c}'_1 = -i \tilde{c}_2, \quad \tilde{c}'_2 = -i \tilde{c}_1$$

$$\tilde{c}''_2 = -\tilde{c}_2 \quad (\text{Schwinger})$$

t

Lösung ist $\tilde{C}_2 = \sin \Omega(t) = \sin \int_{-\infty}^t \Omega(t') dt'$
 mit der Anfangsbedingung die sicherstellt, daß
 $w_2 = C_2^* C_2$, Wahrscheinlichkeit das System
 in oberen Zustand zu finden $= 0$ ist vor
 Ausschalten des Störpulses

— 127

$t = -\infty$ (vor Störung)

● 117

127 ● $t > -\infty$ (nach Störung)

117 ●

$$w_1 + w_2 = 1$$

Wahrscheinlichkeit System in Zustand 127

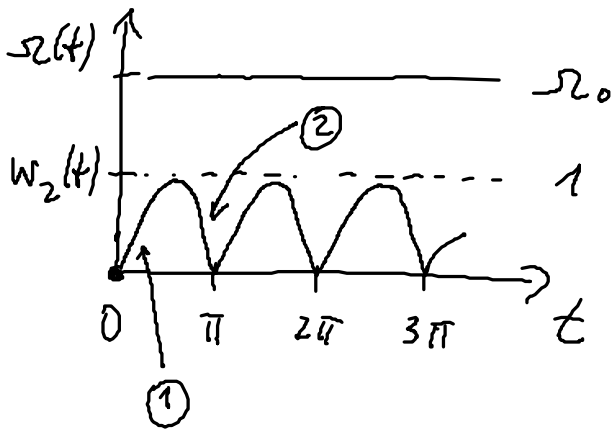
zu finden $w_2(t) = C_2^*(t) C_2(t) = \sin^2 \int_{-\infty}^t \Omega(t') dt'$

Bemerkungen:

a) Die Oszillationen dem $w_2(t)$ unterliegt
 heißen Rabi-Oszillationen.

b) w_2 ändert sich zeitabhängig zwischen 0 und 1

c) Grenzfall: Rechteckpuls $\Omega(t) = \Omega_0 = \text{konstant}$
 (zum Zeitpunkt $t=0$)



in ≈ 3 Wochen
 (WÄ im Netz,
 Dgl. unnumerisch)

d) externes Feld „treibt“ Elektron von $|1\rangle \xrightarrow{\textcircled{1}}$
 (stimulierte Absorption)

$|2\rangle \xrightarrow{\textcircled{2}}$ $|1\rangle$ (stimulierte Emission)

später genauer wenn Licht-Materie WW

e) man spricht auch von Pauli-Blockierung
 (Pauli-Verbot)

3.1.3. Optische Absorption am ZNS

Elektrodynamik $P = \epsilon_0 \chi(\omega) E(\omega)$
 Suszeptibilität

Brechzahlen: $n^2 = 1 + \chi(\omega)$

$n=1$ Vakuum $(n_{\text{vak}} + \delta n)^2 = 1 + \chi$

1 4
 Atom
 (Z N S)

$$1 + 2 \delta u = 1 + \chi$$

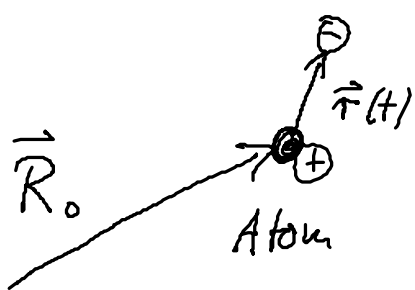
Änderung der Brechzahl proportional χ des Atoms

$\alpha(\omega)$, die Absorption ist prop. $\text{Im}(\delta u(\omega))$

$$\alpha(\omega) \sim \text{Im}(\delta u) = \frac{1}{2} \text{Im}(\chi(\omega))$$

$P(\omega) = \epsilon_0 \chi(\omega) E(\omega)$, $\chi(\omega)$ ist gesucht um $\alpha(\omega)$ zu bestimmen

$$P(t, \vec{R}) = \text{Dipoldichte} = \langle q \vec{r} \rangle \delta(\vec{R} - \vec{R}_0)$$



Elektron mit Ladung q

Ort des Atoms

$\langle q \vec{r} \rangle$ Erwartungswert des Dipolmoments

$$\langle q \vec{r} \rangle = \langle \psi | q \vec{r} | \psi \rangle, \quad |\psi\rangle = c_1(t)|1\rangle + c_2(t)|2\rangle$$

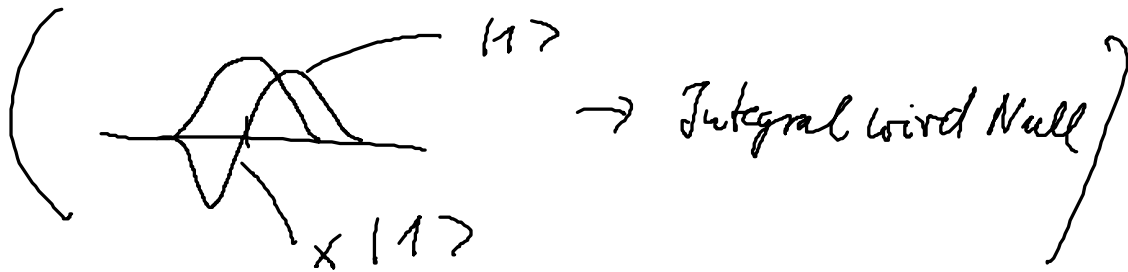
$$= q \left(\underbrace{\langle 1 | \vec{r} | 2 \rangle}_{d_{12}} c_1^*(t) c_2(t) + \underbrace{\langle 2 | \vec{r} | 1 \rangle}_{d_{21}} c_2^*(t) c_1(t) \right)$$

$$q r_{12} = d_{12}$$

$$q r_{21} = d_{21}$$

Dipolmoment

$d_{11} = 0 = d_{22}$ sind permanente Dipole
und sind oft mal $= 0$. (Bsp. folgt)



Suche jetzt $d_{12} = ?$, $c_1^*(t) c_2(t)$ um
Dipol direkt zu berechnen

Dipolmoment $\neq \langle 1 | \vec{r} | 2 \rangle$

H-Atom - optische Absorption

$2p_z$ \uparrow $2p_z$ -Zustand ist Beispiel

$1s$ \bullet Grundzustand in dem El vor Störung sitzt $w_1 = 1$

$|1s\rangle, |2p_z\rangle$ $|1s\rangle \sim e^{-r/a_0}$

$|n=1, l=0, m_l=0\rangle, |n=2, l=1, m_l=0\rangle$

$$d_{12} = q \langle 1s | \vec{r} | 2p_z \rangle = \frac{128\sqrt{2}}{243} a_0 q$$

\uparrow \uparrow
 muß berechnet werden \uparrow \uparrow
 ÜA \uparrow Bohr'scher Radius

$$d_{11} = 0 = \int dr r^2 \int d\varphi \int d\vartheta \sin\vartheta \underbrace{r \cos\vartheta}_{z\text{-Komponente von } \vec{r} = (x, y, z)} e^{-2r/a_0}$$

Kugelkoordinaten \uparrow

das ϑ -Integral gibt Null

$$\int_0^\pi d\vartheta \sin\vartheta \cos\vartheta = \int_{-1}^1 dx x = \frac{x^2}{2} \Big|_{-1}^1 = 0$$

Diagonalelemente sind Null $d_{ii} = 0$ (symmetrisch)

$c_1^* c_2(t)$ fehlt noch

$$\dot{c}_2 = -i\omega c_2(t) - i\Omega_{21}(t) c_1$$

$$\Omega_{21} = ? \quad \underbrace{V(t) = -q \vec{r} \cdot \vec{E}(t)}$$

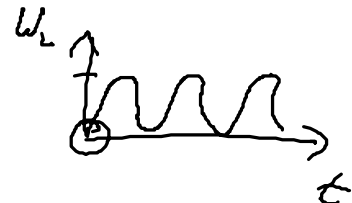
Störoperator eines el. Felds das an
Elektron (\vec{r}) angreift

Dipolenergie ($-\vec{d} \cdot \vec{E}$)

$$\frac{\langle 2 | V(t) | 1 \rangle}{\hbar} = \Omega_{21} = \frac{\vec{E}(t) \cdot \vec{d}_{21}}{\hbar}$$

d_{21} enthält Information über Material

$$c_2(t) = -i \int_{-\infty}^t dt' e^{-i\omega_2(t-t')} \Omega_{21}(t') c_1(t')$$

Näherung: Störung Ω_{21} ist schwach 

$$c_1(t') \underset{\uparrow}{=} e^{-i\omega_1 t'} \cdot 1 \quad (\dot{c}_1 = -i\omega_1 c_1)$$

freie Lsg. ohne Störung

dann ist man linear in Störung Ω

$$c_2(t) = -i \int_{-\infty}^t dt' \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \frac{E(\omega) d_{21}}{\hbar} e^{-i\omega t'} e^{-i\omega_2(t-t')} e^{-i\omega_1 t'}$$

$$= -i \int d\omega e^{-i\omega t} \frac{E(\omega) d_{21}}{\hbar} \underbrace{\int_{-\infty}^t dt' e^{-i(\omega_2 - \omega_1 - \omega)(t-t')}}_{\int_0^{\infty} ds e^{-i(\omega_2 - \omega_1 - \omega)s}} e^{-i\omega_1 t}$$

$-\infty \rightarrow \delta\text{-Funktion}$

Heitler-Zetafunktion ζ

gesamt also

$$\pi \delta(\omega_2 - \omega_1 - \omega) + \text{Hauptwert}$$

$$P(\omega) = \langle qr \rangle \delta(\vec{R} - \vec{R}_0) = d_{12} (c_1^* c_2) (\omega) + d_{21} (c_2^* c_1) (\omega) \delta(\vec{R} - \vec{R}_0)$$

Dipoldicke

$$P(\omega) = \left(i d_{12} \frac{\pi E(\omega) d_{21}}{\hbar} \delta(\omega_2 - \omega_1 - \omega) + c.c. \right)$$

$\delta(\vec{R} - \vec{R}_0)$

$$\text{Im}(\chi) \sim \text{Im} \chi \sim \alpha(\omega)$$

$$P(\omega) = \epsilon_0 \chi(\omega) E(\omega)$$

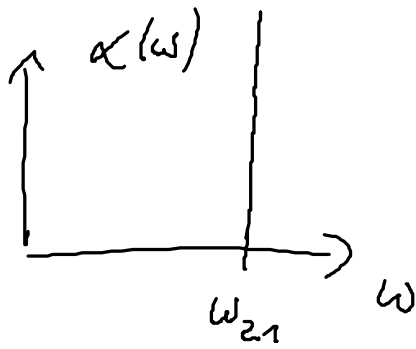
$$\rightarrow \text{Im} \chi(\omega) = \frac{\pi |d_{12}|^2}{\epsilon_0 \hbar} \delta(\omega - \underbrace{(\omega_2 - \omega_1)}_{\omega_{21}})$$

Die Absorption eines Zweilniveausystems ist proportional zum $|d_{12}|^2$ Dipolmoment²

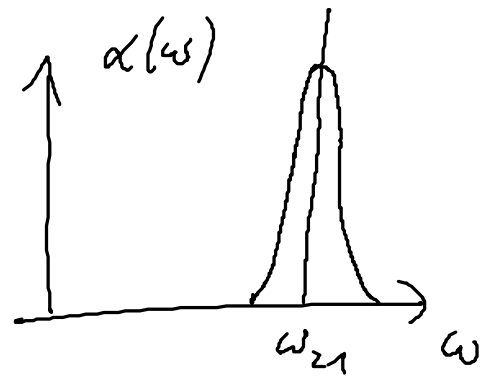
und durch die δ -Funktion wird nur die Frequenz der externen Störung absorbiert die

genau in die E-Lücke des ZNS „paßt“

absorbiert.



Realität
→



In Wirklichkeit wird die Linie verbreitert.

Strahlungsdämpfung, weil der Dipol als Quelle
ein Feld mit sich selbst wechsel wirkt.

nächstes Ziel : warum ist $d_{12} \neq 0$