

## 6. Übungsblatt zur Theoretischen Physik II

### Dipol-Matrix, Zeitabhängige Störungstheorie

Abgabe: Montag 4. Dezember 2006 bis 13:00 Uhr in den Briefkasten im Physik-Altbau.

#### Aufgabe 17 (12 Punkte): Dipol-Matrixelemente

In dem ersten Teil dieser Aufgabe betrachten wir das H-Atom mit den beiden Zuständen  $1s$  und  $2p_z$  als Zwei-Niveau-System. Es sollen die Matrixelemente des Dipol-Hamilton-Operators  $H_{el} = -qzE_z(t)$  berechnet werden.

- Zeigt, dass die diagonalen Matrixelemente verschwinden. (*Wiederholung VL*)
- Berechnet die nicht-diagonalen Matrixelemente.

Nun soll nur der Unterraum für  $n = 2$  betrachtet werden und das elektrische Feld sei zeitunabhängig.

- Bestimmt die Matrixelemente des Hamilton-Operators  $H_{el}$ .  
*Tipp:* Überlegt Euch dazu zuerst, warum die meisten Matrixelemente verschwinden.
- Bestimmt die Energieeigenwerte des Hamilton-Operators  $H = H_0 + H_{el}$  und interpretiert das Ergebnis. (*Tipp:* Ihr braucht nur den Unterraum zu betrachten, in dem die Matrixelemente von  $H_{el}$  nicht verschwinden.)

#### Aufgabe 18 (8 Punkte): Zeitabhängige Störungstheorie: Das Ammoniak-Molekül

Betrachtet das tetraederförmige Ammoniak-Molekül  $\text{NH}_3$ , siehe Abbildung 1, welches unter Vernachlässigung der Schwerpunktsbewegung, der Rotation und der Schwingungen der einzelnen Atome gegeneinander durch zwei Zustände approximiert werden kann: das N-Atom „oben“  $|I\rangle$  bzw. „unten“  $|II\rangle$ . Der Zustandsraum ist in diesem approximativen Fall also zwei-dimensional, d.h.  $\mathcal{H} = \mathbb{C}^2$ , mit orthonormalen Basisvektoren  $|I\rangle$  und  $|II\rangle$ . (*System wird im Tutorium näher erklärt*)

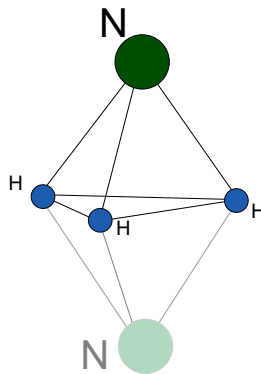


Abbildung 1: Ammoniak-Molekül

Die beiden Basisvektoren liefern den gleichen Energieerwartungswert  $E_0$ , sind aber **nicht** Eigenzustände des Hamilton-Operators  $H = H_0 + W$ , wobei der Operator  $H_0$  das System ohne Störung und der Operator  $W$  die Störung, wodurch die Übergänge zwischen den beiden Zuständen hervorgerufen wird, beschreiben.

- Stellt den Hamilton-Operator  $H$  in der angegebenen Basis auf ( $2 \times 2$ -Matrix).
- Zeigt, dass die einzige unbekannte Größe  $A := \langle II|HI\rangle$  immer positiv reell gewählt werden kann.
- Berechnet die Energieeigenwerte und zeigt, dass die Eigenzustände  $|1\rangle$  und  $|2\rangle$  proportional zu  $|I\rangle + |II\rangle$  und  $|I\rangle - |II\rangle$  sind.

Das Ammoniak-Molekül besitzt ein nicht-verschwindendes elektrisches Dipolmoment  $\mu$ , das senkrecht auf der Ebene der H-Atome steht. In einem homogenen elektrischen Feld der Stärke  $F(t)$ , das senkrecht zur Ebene der H-Atome steht, ist der Energieerwartungswert des Zustandes  $|I\rangle$  daher  $E_0 + \mu F(t)$ , der des Zustandes  $|II\rangle$  entsprechend  $E_0 - \mu F(t)$ . Das Feld sei zeitlich harmonisch moduliert, d.h.  $F(t) = F_0 \cos \omega t$ .

4. Stellen Sie die Matrix des Störungsoperators  $H_1$  auf, die in der oben benutzten Basis diagonal ist.
5. Es soll nun der Fall betrachtet werden, dass sich das System zum Zeitpunkt  $t = 0$  im Zustand  $|1\rangle$  befindet. Zu diesem Zeitpunkt wird dann das elektrische Feld eingeschaltet. Stellt die zugehörige Master-Gleichung auf und interpretiere diese. Diskutiere dabei auch die Bedeutung der einzelnen Terme für kleine Zeiten  $t$ .

- 
- **Internetseite der Veranstaltung:** <http://www.itp.tu-berlin.de/tpii-ws06.html>
  - **Vorlesung:** Mittwoch 12:15 - 14:00 Uhr und Freitag 10:15 - 12:00 Uhr im PN 203
  - **Ergänzungen zur Quantenmechanik:** Vorlesung von Prof. Muschik findet mittwochs von 8:30 bis 10:00 Uhr im Raum P 164 statt
  - **Literatur:**
    - U. Scherz, Quantenmechanik - Eine kompakte Einführung (Teubner, 2005)
    - R. P. Feynman, R. B. Leighton, and M. Sands, Feynman Vorlesungen über Physik, Band 3, Quantenmechanik (Oldenburg, 2001)
    - W. Nolting, Grundkurs Theoretische Physik 5/1 und 5/2 (Springer, 2002)
    - F. Schwabl, Quantenmechanik I+II (Springer 1993)
    - C. Cohen-Tannoudji, B. Diu, F. Laloe, Quantenmechanik 1 und 2 (de Gruyter 1999)
  - **Scheinkriterien:** 50% der Punkte aus den Übungszetteln, aktive Teilnahme an den Tutorien und bestandene Klausur
  - **Sprechstunden:** Prof. Dr. A. Knorr Di, 13:00 - 14:00 Uhr PN 742  
Jan Schlesner Do, 13:30 - 14:30 Uhr PN 627/28  
Die restlichen Sprechstunden werden nach Einteilung der Tutorien bekanntgegeben.
  - **Klausur:** Mittwoch, 7. Februar 2007, 12:00 - 14:00. Raum wird noch bekannt gegeben.
  - **Mathematica-Kurs:** <http://www.physik.tu-berlin.de/pcpool/kurse/mathematica/>