

Name: _____ Gruppe: _____

1	2	Σ (0)

Aufgabe 12.1 Harmonischer Oszillator (0 Punkte)

In Aufgabe 9.1 haben wir den Harmonischen Oszillator besprochen; hier schauen wir uns *Superpositionen* an:

Ein Teilchen befinde sich im überlagerten Zustand

$$\Psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\psi_0(x) e^{-iE_0 t/\hbar} + \psi_2(x) e^{-iE_2 t/\hbar} \right)$$

aus Grund- und *zweiter* angeregter Mode.

- Erstellen Sie eine Visualisierung der überlagerten Wellenfunktion $\Psi(x)$ im Zeitverlauf.
- Zeigen Sie, dass $\langle x \rangle(t) = 0$, der Erwartungswert des Teilchens also im Zentrum verharret.
- Zeigen Sie, dass $\langle x^2 \rangle(t) = \frac{3}{2} \frac{\hbar}{m\omega_0} + \frac{\sqrt{2}}{2} \frac{\hbar}{m\omega_0} \cos(2\omega_0 t)$, das Wellenpaket also „atmet“.

Aufgabe 12.2 Laserratengleichung (0 Punkte)

Wir betrachten zunächst ein dreistufiges Lasersystem, bestehend aus

- Niveau 1: Grundzustand, Population $N_1(t)$; wird durch spontane, $A_{21} N_2(t)$, sowie stimulierte Emission, $B_{21} N_2(t) S(t)$, gefüllt
- Niveau 3: Pumpniveau, Population $N_3(t)$; wird mit Pumprate $p N_1(t)$ gefüllt
- Niveau 2: Laserebene, Population $N_2(t)$; wird durch Relaxation $A_{32} N_3(t)$ gefüllt; dazu
- Strahlungs- bzw. Photonendichte $S(t)$ der Laser-Mode.

Dabei stehen die A_* und B_* für die Einstein-Koeffizienten zwischen den Niveaus, P für den Pumpvorgang.

Die Laser-Ratengleichung für drei Niveaus wird also wie folgt modelliert:

$$\begin{aligned}\dot{N}_3 &= p N_1 - A_{32} N_3, \\ \dot{N}_2 &= A_{32} N_3 - A_{21} N_2 - B_{21} S N_2, \\ \dot{N}_1 &= A_{21} N_2 + B_{21} S N_2 - P N_1; \\ \dot{S} &= \underbrace{\Gamma B_{21} S N_2}_{\text{stimul. Emission}} + \underbrace{\beta A_{21} N_2}_{\text{spont. Emission}} - \underbrace{S/\tau_{\text{ph}}}_{\text{Verluste}}.\end{aligned}$$

Als didaktische Reduktion führen wir die folgenden Modellannahmen zur Vereinfachung ein:

- Adiabatische Eliminierung von $N_3(t)$: wir $\dot{N}_3 = 0$ und ignorieren dieses Niveau im Weiteren;
- Vernachlässigung der spontanen Emission: $\beta \ll 1$;
- als konstant angenommene Pumprate, $p N_1 \approx P$.

(a) Zeigen Sie, dass wir ein effektives Zwei-Niveau-System erhalten, welches beschrieben wird durch

$$\begin{aligned}\dot{N}_2 &= P - A_{21} N_2 - B_{21} S N_2, \\ \dot{S} &= \Gamma B_{21} S N_2 - S/\tau_{\text{ph}}.\end{aligned}$$

(b) **Stationäre Lösung** Bestimmen Sie die stationäre Lösung, d.h. $\dot{N}_2 = \dot{S} = 0$; leiten Sie Ausdrücke für N_2^* und S^* in Abhängigkeit von P , A_{21} , B_{21} , ρ , Γ sowie τ_{ph} her.

(c) **Numerische Lösung, für Interessierte**

- (1) Implementieren Sie das reduzierte Gleichungssystem in Python und nutzen Sie z.B. den Runge-Kutta-Solver `scipy.integrate.solve_ivp`.
- (2) Wählen Sie beispielhafte Parameter unterhalb und oberhalb der Schwelle und integrieren Sie das System über ein sinnvolles Zeitintervall.
- (3) Erzeugen Sie Plots für $N_2(t)$ und $S(t)$ sowie ein Phasendiagramm (N_2, S) .
- (*) Untersuchen Sie das Auftreten von Relaxationsoszillationen und deren Frequenz als Funktion der Pumpstärke P

Aufgabe 12.3 Notizzettel (0 Punkte)

Bereiten Sie einige Notizen („Spickzettel“) für die Klausur vor.

Regeln:

- 1 DIN A4-Seite,
- handgeschrieben (auch am Tablet + ausdrucken ist in Ordnung).

Schauen Sie insbesondere in folgende Aufgaben:

- **0.1**
- 1.1, 1.2 (ohne Herleitung); 1.3 (Konzepte)
- 2.1 (ohne Herleitung); 2.3 (Konzepte)
- 3.2 (Konzepte); 3.3 (Interpretation)
- **4.1**, **4.2** (Experiment, Rechnung, Ergebnis, Interpretation); **4.3** (Konzepte)
- **5.1** (Modell, Herleitung)
- 6.1 (Konzept); **6.2** (Formel, Konzept, Interpretation), **6.3** (Formel)
- **7.*** (Konzepte, grundlegende Ideen zur Berechnung)
- **8.3** (Modell, Formel, Zahlenwert)
- **9.1** (Konzepte, Zustände), **9.3** (Konzepte)
- **10.1** (Konzept); **10.2** (Notationen); **10.3** (Experiment, Beobachtung, Interpretation); 10.4 (Konzept)
- **11.1** (Experiment, Modell, Interpretation); **11.2** (Experiment, Modell und Rechnung, Interpretation); **11.3** (Experiment, Interpretation)
- **12.1** (Rechnung, Konzept); **12.2** (Konzept, stationäres Regime); (**12.4** (Konzept, Folgerung, Symmetrieeigenschaften))

Aufgabe 12.4 Zwei Elektronen (0 Punkte)

Bonusaufgabe In dieser Aufgabe haben wir versucht, eine Aufgabe zu Singulett- und Triplet-Zuständen zu bauen, die einigermaßen lösbar sein könnte; leider ist sie aber viel zu lang in der heißen Phase der Klausurvorbereitung. Sie einfach zu löschen war uns aber auch zu schade ... vielleicht hilft es später mal für die Quantenmechanik II-Vorlesung.

In Aufgabe 10.4 hatten wir das „Abzählspielchen“ für Fermionen etwas vereinfacht dargestellt. In dieser Aufgabe schauen wir uns die Zwei-Elektronen-Wellenfunktion genauer an.

Die Wellenfunktion $\Psi(1,2)$ ist das Produkt aus Orts- $\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$ und Spinwellenfunktion $\chi(s_1, s_2)$, außerdem muss sie antisymmetrisch unter Vertauschung der Elektronen sein:

$$\Psi(1,2) = \Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \chi(s_1, s_2); \quad \Psi(1,2) = -\Psi(2,1).$$

Genau ein Anteil muss daher symmetrisch, der andere antisymmetrisch sein:

$$\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \mp \Psi(\vec{r}_2, \vec{r}_1) \quad \Leftrightarrow \quad \chi(s_1, s_2) = \pm \chi(s_2, s_1)$$

(a) Der Spin-Operator ist ein Vektoroperator, aufgebaut aus den drei Paulischen Spin-Matrizen:

$$\vec{s} = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} \hat{\sigma}_x \\ \hat{\sigma}_y \\ \hat{\sigma}_z \end{pmatrix}; \quad \hat{s}_\mu = \hat{\sigma}_\mu; \quad |\chi_+\rangle = |+\frac{1}{2}\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |\chi_-\rangle = |-\frac{1}{2}\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}; \quad \hat{\sigma}_x \cong \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{\sigma}_y \cong \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{\sigma}_z \cong \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

Nun betrachten wir gemeinsam die Spins *zweier Elektronen*; die Produktbasis schreiben dabei wir in der Form

$$\left\{ |+\frac{1}{2}, +\frac{1}{2}\rangle, |+\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle, |-\frac{1}{2}, +\frac{1}{2}\rangle, |-\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle \right\},$$

und wir führen Gesamtspinoperator

$$\vec{S} := \vec{S}_1 + \vec{S}_2 \quad \text{mit} \quad \vec{S}_1 := \hat{S}_{1,\mu} = \frac{\hbar}{2} \hat{\sigma}_\mu \otimes \hat{1} \quad \text{und} \quad \vec{S}_2 := \hat{S}_{2,\mu} = \hat{1} \otimes \frac{\hbar}{2} \hat{\sigma}_\mu$$

ein; dabei misst $\vec{S}_i$ den Spin des i -ten Elektrons, lässt den anderen unberührt (Tensorprodukt mit einer 2-dimensionalen Identität). Zwei der sechs Komponenten von $\vec{S}_i$ lauten beispielsweise

$$\hat{S}_{1x} \cong \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{S}_{2y} \cong \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 & 0 \\ i & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -i \\ 0 & 0 & i & 0 \end{pmatrix}.$$

(a) Notieren Sie $\hat{S}_{1z}$ und $\hat{S}_{2z}$ als Matrizen; zeigen Sie, dass

$$\hat{S}_{1z} \cdot \hat{S}_{2z} \cong \frac{\hbar^2}{4} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

(b) Gesamtspin Der Gesamtbetrag des Spins wird durch den Operator $\vec{S}^2$ gemessen. Für diesen Vektoroperator gilt:

$$\vec{S}^2 = \left(\vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2 \right)^2 = \vec{S}_1^2 + \vec{S}_2^2 + 2 \vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2; \quad \vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2 = \sum_{\mu=x,y,z} \hat{S}_{1\mu} \cdot \hat{S}_{2\mu};$$

hier misst $\vec{S}_i^2$ jeweils den Spin des i -ten Elektrons.

Der Kreuzterm $2 \vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2$ erfasst die *Wechselwirkung zwischen den Spins*; mathematisch erzeugt er Off-Diagonal-Kopplungen in der Matrix. Daher entwickeln wir gleich eine neue Basis, in welcher $\vec{S}^2$ diagonal wird. Zuvor:

(b) Zeigen Sie mit dem Ergebnis aus (a) und

$$\hat{S}_{1x} \cdot \hat{S}_{2x} \cong \frac{\hbar^2}{4} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{S}_{1y} \cdot \hat{S}_{2y} \cong \frac{\hbar^2}{4} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad \text{dass} \quad \vec{\hat{S}}_1 \cdot \vec{\hat{S}}_2 \cong \frac{\hbar^2}{4} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 2 & 0 \\ 0 & 2 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

(c) **Die fertige Matrix**

(c) Wir „wissen“, dass $\vec{\hat{S}}_1^2 = \vec{\hat{S}}_2^2 = \frac{3}{4}\hbar^2 \hat{1}$; zeigen Sie, dass wir damit diesen Ausdruck erhalten:

$$\vec{\hat{S}}^2 = \vec{\hat{S}}_1^2 + \vec{\hat{S}}_2^2 + 2 \vec{\hat{S}}_1 \cdot \vec{\hat{S}}_2 \cong \hbar^2 \begin{pmatrix} 2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 2 \end{pmatrix}.$$

(d) **Singulett- und Triplet-Zustände** Wie angekündigt suchen wir nun eine neue Basis, in welcher $\vec{\hat{S}}^2$ Diagonalgestalt annimmt; denn damit haben wir ja gerade die Eigenwerte (Spin) und Eigenvektoren (Zustände) gefunden.

(d) Zeigen Sie, dass

$$\vec{\hat{S}}^2 |\chi\rangle = \begin{cases} 0 |\chi\rangle, & |\chi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(|+\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle - |-\frac{1}{2}, +\frac{1}{2}\rangle \right), & \text{(Singulett)}, \\ 2\hbar^2 |\chi\rangle, & |\chi\rangle = \begin{cases} |-\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle, \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \left(|+\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle + |-\frac{1}{2}, +\frac{1}{2}\rangle \right), \\ |+\frac{1}{2}, +\frac{1}{2}\rangle, \end{cases} & \text{(Triplet)}. \end{cases}$$

Daraus lernen wir: Die etwas umständlich wirkenden Singulett- und Triplet-Zustände sind Eigenzustände zu S^2 . Die Vorzeichen in den Linearkombinationen verraten uns: das Singulett ist antisymmetrisch (Vorzeichenwechsel unter Vertauschung der Teilchen), das Triplet hingegen symmetrisch. Entsprechend muss die Parität der Ortswellenfunktion gerade anders-symmetrisch gewählt werden.

Weitere Bemerkungen Warum $\vec{\hat{S}}^2$? Wie schon im Ein-Teilchen-System kommutieren $\vec{\hat{S}}^2$ und $\hat{S}_z$ miteinander, ebenso mit dem Hamilton-Operator $\hat{H}$. Das heißt, wir können eine Basis finden, in welcher sowohl die Energien ($\hat{H}$), der Gesamtspin ($\vec{\hat{S}}^2$) sowie die Spin-Projektion in die (o.B.d.A.) $\hat{e}_z$ -Richtung ($\hat{S}_z$) gleichzeitig existieren; damit haben wir einen Satz „guter Quantenzahlen“.

Wie beim einzelnen Elektron im Wasserstoffatom gilt: $\hat{S}_z$ misst die Projektion des Spins in eine Raumrichtung; mögliche Messwerte sind dabei die $m_s \hbar = \{-S, \dots, +S\} \hbar$, wobei die S aus den Eigenwerten $S(S+1)\hbar^2$ zu $\vec{\hat{S}}^2$ stammen:

- Für das einzelne Elektron haben wir $m_s = \pm \frac{\hbar}{2}$.
- Im Singulett gibt es zum Gesamtspin $S = 0$ nur $m_z = 0$.
- Im Triplet sind für $S = 1$ die Projektionen (Spineinstellungen) $m_z = \{-1, 0, +1\} \hbar^2$ möglich.