

Theoretische Physik: Fortgeschrittene Vielteilchentheorie, Übung 3

Prof. Dr. Hans Peter Büchler WS 2012/13, 30. Oktober 2012

1. Van-der-Waals Wechselwirkung (Schriftlich)

Betrachte zwei Wasserstoffatome (A, B) in großem Abstand \mathbf{R} , so dass es zu keinem Überlapp der elektronischen Ladungsverteilungen kommt, und ortsfesten Kernen (Born-Oppenheimer-Näherung). Sei H_α der Hamiltonoperatoren eines einzelnen Wasserstoffatoms. Das System wird nun vollständig durch den Hamiltonoperator

$$H = H_A + H_B + H_{int} \quad (1)$$

beschrieben, wobei H_{int} die Coulombwechselwirkung zwischen den Elektronen und den positiv geladenen Kernen beschreibt, d.h.,

$$H_{int} = \frac{e^2}{R} + \frac{e^2}{|\mathbf{R} + \mathbf{r}_B - \mathbf{r}_A|} - \frac{e^2}{|\mathbf{R} + \mathbf{r}_B|} - \frac{e^2}{|\mathbf{R} - \mathbf{r}_A|}, \quad (2)$$

mit \mathbf{r}_i ($i \in A, B$) die Position der Elektronen in Bezug zum Kern i . Für grosse $\mathbf{R} \gg a_0$ (Bohr-Radius) entwickelt man H_{int} in Potenzen von \mathbf{r}_i/\mathbf{R} und erhält die Dipol-Dipol-Wechselwirkung

$$H_{int} = \frac{1}{R^3} \left[\mathbf{d}_A \mathbf{d}_B - \frac{3(\mathbf{d}_A \cdot \mathbf{R})(\mathbf{d}_B \cdot \mathbf{R})}{R^2} \right], \quad (3)$$

mit den Dipoloperatoren $\mathbf{d}_i = e\mathbf{r}_i$. Im folgenden wollen wir jetzt die Energiekorrektur des Zustandes $|g\rangle_A |g\rangle_B$ mit beiden Atomen im tiefsten Energiezustand $|g\rangle_i$ durch diese Störung berechnen. Dabei halten wir die Distanz \mathbf{R} zwischen den Atomen fixiert. Die Energiekorrektur $\Delta E(\mathbf{R})$ wird dadurch abhängig von der Distanz zwischen den Atomen und lässt sich in der sogenannten Born-Oppenheimer-Näherung als Wechselwirkung interpretieren.

- Zeige, dass die Störungstheorie in erster Ordnung keinen Beitrag liefert.
- Betrachte für die Störungstheorie 2. Ordnung ein vereinfachtes Modell, wobei wir annehmen, dass der Dipoloperator nur an einen angeregten Zustand $|e\rangle_i$ koppelt, d.h., $\langle e|\mathbf{d}_i|g\rangle_i = d/\sqrt{3}\mathbf{e}_z$ mit \mathbf{e}_z dem Einheitsvektor entlang der z-Achse. Zeige, dass die Energiekorrektur in zweiter Ordnung immer negativ ist, und somit eine Anziehung zwischen den Atomen beschreibt. Wie sieht die räumliche Abhängigkeit der induzierten Wechselwirkung aus? Zeige, dass die Wechselwirkung mit $1/R^6$ abfällt.
- Löse jetzt das Problem, wobei die Entartung im angeregten p-Zustand des Wasserstoffatoms berücksichtigt werden soll, d.h., jedes Atom hat die 3-fach entarteten Zustände $|2, 1, m\rangle$ mit Hauptquantenzahl $n = 2$, Drehimpuls $l = 1$, und $m = 0, \pm 1$. Zeige, dass die van-der-Waals Wechselwirkung nun ein isotropes Verhalten zeigt.

2. Fermis Goldene Regel in einem periodischen Potential

Leite Fermis Goldene Regel für folgende periodische Störung her

$$H_1 = V \cos(\omega t) \exp \eta t \quad (4)$$

3. Zeitabhängige Störungstheorie

Wir analysieren einen ein dimensional harmonischen Oszillator mit der Masse m und Frequenz ω in einem zeitabhängigen elektrischen Feld. Der Hamiltonian hat die Form $H = H_0 + H'(t)$, mit $H_0 = p^2/2m + m\omega^2 x^2/2$ (harmonischer Oszillator) und $H'(t) = xD(t)$ (Störung). Die Zeitabhängigkeit des externen elektrischen Feldes hat die Form

$$D(t) = A \frac{1}{\sqrt{\pi\tau}} e^{-(t/\tau)^2} \quad (5)$$

- Bestimme in 1. Ordnung Störungstheorie, die Übergangswahrscheinlichkeit vom Grundzustand in einen angeregten Zustand $P_{0 \rightarrow n}(\infty)$, d.h. die Übergangswahrscheinlichkeit für große Zeiten $t \rightarrow \infty$. Was passiert für $\tau \rightarrow 0$?
- Die Übergangswahrscheinlichkeit kann auch exakt gelöst werden. Beweise, dass die exakte Übergangswahrscheinlichkeit die Form

$$P_{0 \rightarrow n}(\infty) = \frac{K^{2n}}{n!} \exp(-K^2) \quad \text{mit} \quad K = \frac{A \exp(-\omega^2 \tau^2 / 4)}{\sqrt{2m\omega\hbar}} \quad (6)$$

hat und vergleiche das Ergebnis mit Teilaufgabe a).

Tipp: Arbeite im Dirac-Bild und leite die Bewegungsgleichung her.

$$i\partial_t |\psi_D(t)\rangle = H_D |\psi_D(t)\rangle \quad \text{mit} \quad H_D = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} D(t) [e^{-i\omega t} a + e^{i\omega t} a^\dagger]. \quad (7)$$

Benutze den Ansatz $|\psi_D(t)\rangle = \exp(-iK(t)a^\dagger) |\bar{\psi}(t)\rangle$ und wähle $K(t)$ so, dass a^\dagger aus der Schrödingergleichung eliminiert wird. Mit der Relation $e^{iKa^\dagger} a e^{-iKa^\dagger} = a - iK$ ist die restliche Gleichung trivial zu lösen und man erhält die exakte Lösung $|\psi(t)\rangle$ für die Wellenfunktion im Schrödinger-Bild. Die Übergangswahrscheinlichkeit ist dann $P_{0 \rightarrow n}(\infty) = |\langle n | \psi(\infty) \rangle|^2$.