Übung 1. Ring mit Streuer

(a) Wir wählen die Eichung $\boldsymbol{A} = \frac{\Phi}{2\pi R^2}(-Y, X, 0)^T$ in den Kartesischen Koordinaten X, Y, Z (im Gegensatz zur 1D Koordinate x entlang des Rings) und mit $R = L/2\pi$ dem Radius des Rings. Damit gilt (wie verlangt) für den magnetischen Fluss durch den Ring

$$\oint d\boldsymbol{l}\boldsymbol{A} = \Phi, \tag{L.1}$$

und entlang des Rings $A_x = \frac{\Phi}{L}$. Durch die Transformation $\Psi(x) \to e^{-i\alpha x/L}\Psi(x)$ ergibt sich

$$\left\{\frac{1}{2m}\left[\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x} + \frac{e}{c}A_x(x)\right]^2 + V(x)\right\}\Psi(x) \to \left\{\frac{1}{2m}\left[\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x} + \frac{e}{c}A_x(x)\right]^2 + V(x)\right\}\Psi(x)e^{-i\alpha x/L}, \tag{L.2}$$

also

$$\left\{\frac{1}{2m}\left[\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x} + \frac{e}{c}A_x(x) - \frac{\hbar\pi}{L}\right]^2 + V(x)\right\}\Psi(x) \underbrace{=}_{\alpha := \frac{2\pi\Phi}{\Phi_0}} \left\{-\frac{\hbar}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x)\right\}\Psi(x) = E\Psi(x), \tag{L.3}$$

mit der Ranbedingung

$$\Psi(x) = \Psi(x+L) \to \Psi(x)e^{-i\alpha x/L} = \Psi(x+L)e^{-i\alpha(x+L)/L} \tag{L.4}$$

$$\Rightarrow \quad \Psi(x)e^{i\alpha} = \Psi(x+L). \tag{L.5}$$

Damit hat $\Psi(x)$ Bloch-Form und die Schrödingergleichung lässt sich (vgl. Skript (3.8)) schreiben als

$$\left[-\frac{\hbar}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x)\right]\psi_{\alpha,n}(x) = \epsilon_{\alpha,n}\psi_{\alpha,n}(x), \quad \text{mit} \quad \psi_{\alpha,n}(x+L) = e^{i\alpha}\psi_{\alpha,n}(x). \tag{L.6}$$

(b) Das Spektrum entpricht dem eines freien Teilchens mit periodischen Randbedingungen (diskretes Spektrum) mit

$$\epsilon_n(\alpha = 0) = \frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{2\pi n}{L}\right)^2 \tag{L.7}$$

und

$$\epsilon_{\alpha,n} = \frac{\hbar^2}{2mL^2}(2\pi n - \alpha)^2 \tag{L.8}$$

Im Festkörper entspricht $\alpha \leftrightarrow k$, dem Kristallimpuls, der immer in der 1. BZ liegt. Hier ist α ein äusserer Parameter, der beliebig fixiert werden kann. Für $\alpha' = \alpha + 2\pi$ ist die Physik jedoch dieselbe. Dies entspricht der Quantisierung des Flusses.

(c) Nun wollen wir das Problem und damit $V(x)$ störungstheoretisch behandeln. Dies entspricht formal exakt dem Beispiel "1D periodisches Potential" in Kapitel 9.3 des Skripts. D.h. die Periodizität des Potentials und damit das Mischen von Energieeigenwerten zu n und n' erzeugt Bandlücken im Spektrum, vgl. Fig. **??**.

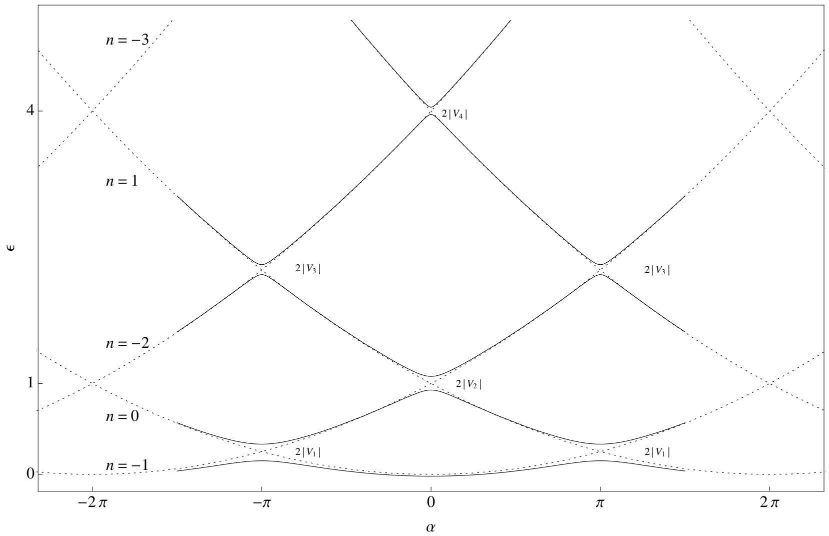

Abbildung 1: Die Entartungen des Spektrums für $V = 0$ (gestrichelte Linie) werden für endliches, periodisches Potential $V \neq 0$ durch die verschiedenen Fourierkomponenten V_n des Potentials aufgehoben (durchgezogene Linie).

Übung 2. Harmonischer Oszillator im elektrischen Feld

Der freie Hamilton-Operator (ohne E-Feld) lautet:

$$H_0 = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2. \tag{L.9}$$

Der volle, zeitabhängige Hamilton-Operator ist

$$H(t) = H_0 + H'(t), \quad H'(t) = -eEx\Theta(t), \tag{L.10}$$

mit der Heaviside-Theta Funktion $\Theta(t)$, so dass für $t > 0$:

$$H(t) = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2(x - x_0)^2 + \varepsilon_0, \tag{L.11}$$

wobei $x_0 = \frac{eE}{m\omega^2}$ und $\varepsilon_0 = -\frac{m\omega^2}{2}x_0^2$. $H(t)$ stellt also einen bis auf eine additive Konstante ε_0 um x_0 verschobenen harmonischen Oszillator dar.

(a) Für den Übergang $0 \to 1$ können wir Formel (9.87) des Skripts anwenden:

$$P_{0\to1}(t) = \left(\frac{\sin\frac{\omega_{01}t}{2}}{\frac{\hbar\omega_{01}}{2}}\right)^2 |\langle 1|(-eEx)|0\rangle|^2 + O(t^4), \tag{L.12}$$

wobei $\hbar\omega_{01} = (E_1 - E_0) = \hbar\omega$, also

$$P_{0\to1}(t) = 4\left(\frac{eE}{\hbar\omega}\right)^2 \sin^2\left(\frac{\omega t}{2}\right) |\langle 1|x|0\rangle|^2 + O(t^4). \tag{L.13}$$

Es ist $\langle 1|x|0\rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\langle 1|a + a^\dagger|0\rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}$, so dass mit $\alpha_0 = -\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}x_0$ folgt

$$P_{0\to1}(t) = \frac{1}{2}\frac{(eE)^2}{\hbar m\omega^3}(\omega t)^2 + O(t^4) = |\alpha_0|^2(\omega t)^2 + O(t^4). \tag{L.14}$$

(b) Um $P_{0\to 0}$ bis einschliesslich $O(t^2)$ in zeitabhängiger Störungstheorie zu berechnen, müssen wir auch den $O(H'^2)$-Term in der Störreihe berechnen, denn gemäss Skript (9.83):

$$P_{0\to 0}(t) = \Big| \underbrace{\langle 0|0\rangle}_{=1} - \underbrace{\frac{i}{\hbar}\int_0^t \mathrm{d}t_1 \langle 0|H'_D(t_1)|0\rangle}_{=0} \tag{L.15}$$

$$- \frac{1}{2\hbar^2}\int_0^t \mathrm{d}t_1\mathrm{d}t_2 \langle 0|T[H'_D(t_1)H'_D(t_2)]|0\rangle + O(t^3)\Big|^2, \tag{L.16}$$

wobei $H'_D(t) = e^{itH_0/\hbar}H'(t)e^{-itH_0/\hbar}$, und $T[\ldots]$ das zeitgeordnete Produkt bedeutet. Wegen $\langle 0|x|0\rangle$ verschwindet das erste Integral, so dass:

$$P_{0\to 0}(t) = \left|1 - I(t) + O(t^3)\right|^2 = 1 - 2\,\mathrm{Re}\, I(t) + O(t^3), \tag{L.17}$$

mit $I(t) = \frac{1}{2\hbar^2}\int_0^t \mathrm{d}t_1\mathrm{d}t_2\langle 0|T[H'_D(t_1)H'_D(t_2)]|0\rangle$. Bleibt uns noch das Integral $I(t)$:

$$I(t) = \frac{1}{\hbar^2}\int_0^t \mathrm{d}t_1 \int_0^{t_1} \mathrm{d}t_2 \langle 0|H'_D(t_1)H'_D(t_2)|0\rangle \tag{L.18}$$

$$= \frac{1}{\hbar^2}\sum_{n=0}^{\infty}\int_0^t \mathrm{d}t_1 \int_0^{t_1} \mathrm{d}t_2 e^{i(E_0-E_n)(t_1-t_2)/\hbar}\langle 0|H'|n\rangle\langle n|H'|0\rangle \tag{L.19}$$

$$= \frac{1}{\hbar^2}\sum_{n=0}^{\infty}\int_0^t \mathrm{d}t_1 \int_0^{t_1} \mathrm{d}t_2 e^{-in\omega(t_1-t_2)}\langle 0|H'|n\rangle\langle n|H'|0\rangle, \tag{L.20}$$

wobei wir das Integral über $\mathrm{d}t_2$ von 0 bis t_1 laufen lassen und wegen $T[\ldots]$ ein Faktor 2 bekommen. Hier ist $H' = -eEx = \alpha_0\hbar\omega(a + a^\dagger)$, so dass $\langle 0|H'|n\rangle = \hbar\omega\alpha_0\delta_{n,1}$. Somit:

$$I(t) = |\alpha_0|^2 \int_0^t \mathrm{d}t_1 \int_0^{t_1} \mathrm{d}t_2 \omega^2 e^{-i\omega(t_1-t_2)} = |\alpha_0|^2 \int_0^\tau \mathrm{d}\tau_1 \frac{1}{i}\left[1 - e^{-i\tau_1}\right] \tag{L.21}$$

$$= |\alpha_0|^2\left(-i\tau + (1 - e^{-i\tau})\right). \tag{L.22}$$

Also ist

$$2\,\mathrm{Re}\, I(t) = 2|\alpha_0|^2(1-\cos\tau) = 4|\alpha_0|^2\sin^2(\frac{\omega t}{2}) = |\alpha_0|^2(\omega t)^2 + O(t^4), \tag{L.23}$$

und $P_{0\to 0} = 1 - |\alpha_0|^2(\omega t)^2 + O(t^4)$.

(c)* Da der Hamilton-Operator ein nach x_0 verschobener harmonischer Oszillator ist, können wir diesen ausdrücken als

$$H = TH_0T^{-1} + \varepsilon_0, \tag{L.24}$$

wobei T der Translationsoperator $T = e^{-ix_0p/\hbar}$ ist (denn $TxT^{-1} = x - x_0$). Daher sind $\tilde{E}_n = E_n + \varepsilon_0$, $n \in \mathbb{N}$ die Eigenwerte von H, und die zugehörigen Eigenvektoren sind $|\tilde{n}\rangle = T|n\rangle$, wobei $E_n = \hbar\omega(n + \frac{1}{2})$ und $H_0|n\rangle = E_n|n\rangle$.

Aus Gl. (L.24) folgt auch dass

$$U(t) = e^{-itH/\hbar} = e^{-it\varepsilon_0/\hbar}TU_0(t)T^{-1}, \tag{L.25}$$

mit dem Zeitentwicklungsoperator des freien Systems $U_0(t) = e^{-itH_0/\hbar}$. Die Wahrscheinlichkeit das System zur Zeit $t > 0$ im n-ten angeregten Zustand bzgl. H_0 zu messen, ist gegeben durch:

$$P_{0\to n}(t) = |\langle n|U(t)|0\rangle|^2. \tag{L.26}$$

Wir berechnen $P_{0\to n}$ exakt:

$$\langle n|U(t)|0\rangle = e^{-i\varepsilon_0 t/\hbar}\langle n|TU_0(t)T^{-1}|0\rangle = e^{-i\varepsilon_0 t/\hbar}\langle n|TU_0(t)|\alpha_0\rangle \tag{L.27}$$

$$= e^{-i\varepsilon_0 t/\hbar}e^{-i\omega t/2}\langle n|T|\alpha(t)\rangle, \tag{L.28}$$

wobei wir aus Serie 7 benutzen das $T^{-1}|0\rangle = e^{ix_0 p/\hbar}|0\rangle = |\alpha_0\rangle$ ein kohärenter Zustand ist, und $U_0(t)|\alpha_0\rangle = e^{-i\omega t/2}|\alpha(t)\rangle$, mit $\alpha(t) = \alpha_0 e^{-i\omega t}$, auch aus Serie 7.

Folglich müssen wir also noch $\langle n|T|\alpha(t)\rangle$ berechnen. Fangen wir an mit $\langle n|T = (T^\dagger|n\rangle)^\dagger$:

$$T^\dagger|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}}T^{-1}(a^\dagger)^n TT^{-1}|0\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}}T^{-1}(a^\dagger)^n T|\alpha_0\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}}(T^{-1}a^\dagger T)^n|\alpha_0\rangle. \tag{L.29}$$

Schreiben wir jetzt $a^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}}(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x - i\frac{1}{\sqrt{m\omega\hbar}}p)$ und benutzen $T^{-1}xT = (x + x_0)$ und $T^{-1}pT = p$, dann folgt

$$T^{-1}a^\dagger T = |\alpha_0| + a^\dagger. \tag{L.30}$$

Demzufolge haben wir

$$\langle n|U(t)|0\rangle = e^{-i\varepsilon_0 t/\hbar}e^{-i\omega t/2}\langle\alpha_0|\frac{1}{\sqrt{n!}}(|\alpha_0| + a)^n|\alpha(t)\rangle. \tag{L.31}$$

Aber da kohärenten Zustände $|\alpha\rangle$ Eigenvektoren zum Eigenwert α des Vernichtunsoperators a sind, also $a|\alpha\rangle = \alpha|\alpha\rangle$, erhalten wir

$$\langle n|U(t)|0\rangle = e^{-i\varepsilon_0 t/\hbar}e^{-i\omega t/2}\frac{1}{\sqrt{n!}}(|\alpha_0| + \alpha(t))^n\langle\alpha_0|\alpha(t)\rangle \tag{L.32}$$

$$= e^{-i\varepsilon_0 t/\hbar}e^{-i\omega t/2}\frac{1}{\sqrt{n!}}|2\alpha_0|^n \sin^n\left(\frac{\omega t}{2}\right)e^{-in(\frac{\omega t-\pi}{2})}\langle\alpha_0|\alpha(t)\rangle. \tag{L.33}$$

Aus $|\alpha_0 - \alpha(t)|^2 = 4|\alpha_0|^2\sin^2\left(\frac{\omega t}{2}\right)$ und $\alpha_0^*\alpha(t) = |\alpha_0|^2(\cos\omega t - i\sin\omega t)$ folgt schliesslich:

$$\langle\alpha_0|\alpha(t)\rangle = e^{-2|\alpha_0|^2\sin^2\left(\frac{\omega t}{2}\right)}e^{-i|\alpha_0|^2\sin\omega t}, \tag{L.34}$$

und als Endergebnis für die Übergangswahrscheinlichkeit $P_{0\to n}$ erhalten wir somit:

$$P_{0\to n} = \frac{1}{n!}|2\alpha_0|^{2n}\sin^{2n}\left(\frac{\omega t}{2}\right)e^{-4|\alpha_0|^2\sin^2\left(\frac{\omega t}{2}\right)}. \tag{L.35}$$

Bis auf $O(t^4)$ finden wir dann:

$$P_{0\to 0}(t) = e^{-4|\alpha_0|^2\sin^2\left(\frac{\omega t}{2}\right)} = 1 - |\alpha_0|^2(\omega t)^2 + O(t^4), \tag{L.36}$$

und

$$P_{0\to 1}(t) = 4|\alpha_0|^2\sin^2\left(\frac{\omega t}{2}\right)e^{-4|\alpha_0|^2\sin^2\left(\frac{\omega t}{2}\right)} = |\alpha_0|^2(\omega t)^2 + O(t^4). \tag{L.37}$$

Beachte, dass $1 - P_{0\to 0}(t) - P_{0\to 1}(t) = O(t^4)$, da aus $\sum_{n=0}^{\infty} P_{0\to n}(t) = 1$ folgt

$$1 - P_{0\to 0}(t) - P_{0\to 1}(t) = \sum_{n\geq 2} P_{0\to n}(t), \tag{L.38}$$

und die rechte Seite ist $O(t^4)$ gemäss Gl. (L.35). Weiterhin sehen wir, dass t und ω immer gepaart auftreten. Neben $|\alpha_0|$ entscheidet deshalb auch ωt über die Güte der Approximation. Beide dimensionslosen Parameter sollten möglichst klein sein, damit eine störungstheoretische Behandlung des Problems möglich ist. Eine Approximation des exakten Resultats durch eine endliche Ordnung der Störreihe ist daher maximal auf einer Zeitskala $t \sim \omega^{-1}$ sinnvoll.