

**Aufgabe 1: Dichtematrix und Blochkugel**

Ein Ensemble aus vielen Atomen mit je zwei Zuständen  $|\text{ground}\rangle$  und  $|\text{excited}\rangle$  kann nicht immer durch eine Wellenfunktion beschrieben werden (dies ist nur korrekt wenn alle Atome im gleichen Zustand sind, die gleichen äußeren Felder spüren und keine Wechselwirkung zwischen den Atomen besteht). Daher benutzt man den Dichtematrix Formalismus in dem die Dichtematrix eines statistischen Gemisches aus Zuständen  $|\Psi_n\rangle$  mit Wahrscheinlichkeiten  $p_n$  gegeben ist durch

$$\hat{\rho} = \sum p_n |\Psi_n\rangle\langle\Psi_n|$$

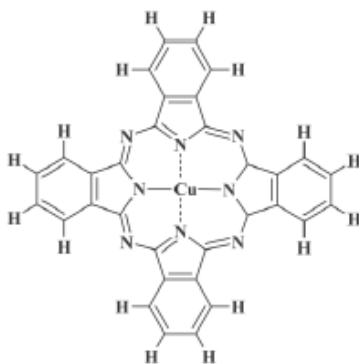
a) Geben Sie die Dichtematrix für die folgenden Fälle an und zeichnen Sie den jeweils zugehörigen Bloch Vektor:

- i. Alle Atome befinden sich im Zustand  $|g\rangle$
- ii. Die Atome aus a) wurden einem resonanten  $\pi$ -Puls ausgesetzt
- iii. Die Atome aus a) wurden einem resonanten  $\pi/2$  Puls ausgesetzt
- iv. Es befindet sich ein Atom im Grundzustand und eines im angeregten Zustand

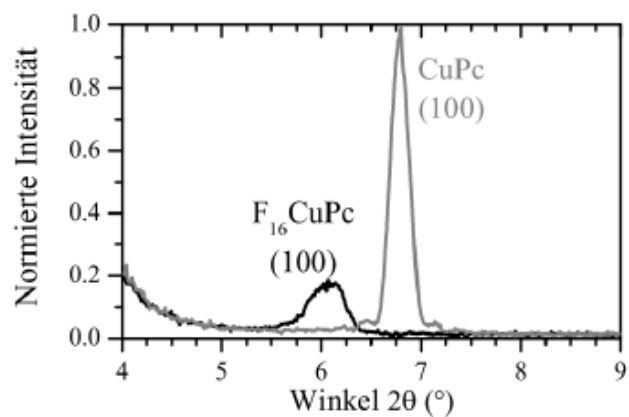
b) Welche messbare Eigenschaft ist im Fall iii und iv unterschiedlich?

**Aufgabe 2 Röntgenreflektometrie**

Kupfer-Phthalocyanin (CuPc, Abb. 1) ist ein blauer Farbstoff, der unter anderem zum Einfärben von PET Flaschen verwendet wird. Außerdem weist CuPc Halbleitereigenschaften auf und findet Anwendung in der organischen Elektronik. Bei fluoriniertem Kupfer-Phthalocyanin ( $F_{16}\text{CuPc}$ ) sind die 16 in Abb. 1 eingezeichneten H-Atome durch Fluor ersetzt. Da es sich hier um molekulare Festkörper handelt, sind die Gitterkonstanten größer als dies z.B. bei Kristallen der Elemente üblich ist. In Abb. 2 sehen Sie die Beugungsmuster von CuPc und  $F_{16}\text{CuPc}$  gemessen mit monochromatischer Röntgenstrahlung der  $\text{Cu-K}_\alpha$ -Linie. Bestimmen Sie aus den Positionen der Beugungspeaks erster Ordnung die Netzebenenabstände der (100) Ebenen der beiden Materialien. Wie lässt sich der unterschiedliche Netzebenenabstand der beiden (sehr ähnlichen) Substanzen begründen?



**Abbildung 1.** Strukturformel des CuPc-Moleküls.



**Abbildung 2.** Beugungsmuster von dünnen Schichten aus CuPc- und  $F_{16}\text{CuPc}$ -Molekülen.

### Aufgabe 3: Übergangswahrscheinlichkeiten

Wie groß sind die Lebensdauer und die Übergangswahrscheinlichkeit  $A_{ik}$  für den Übergang  $1s \rightarrow 2p$  im H-Atom? Die Übergangsfrequenz ist  $\omega_{ik} = 2\pi \cdot 2,47 \cdot 10^{15} \text{s}^{-1}$ .

Verwenden sie für die Rechnung die folgenden Wellenfunktionen:

$n$	$l$	$m$	Eigenfunktionen $\psi_{n,l,m}(r, \vartheta, \varphi)$
1	0	0	$\frac{1}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} e^{-Zr/a_0}$
2	0	0	$\frac{1}{4\sqrt{2\pi}} \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} \left(2 - \frac{Zr}{a_0}\right) e^{-Zr/2a_0}$
2	1	0	$\frac{1}{4\sqrt{2\pi}} \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} \frac{Zr}{a_0} e^{-Zr/2a_0} \cos \vartheta$
2	1	$\pm 1$	$\frac{1}{8\sqrt{\pi}} \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} \frac{Zr}{a_0} e^{-Zr/2a_0} \sin \vartheta e^{\pm i\varphi}$