Störungstheorie (zeitabhängig)

3. Zeitabhängige Störungstheorie

3.1. Wiedesholung stationäre Störungstheorie

Wir betrachten ein System mit

$$H = H_0 + \lambda H_1$$

Die Eigenwerte und Eigenfunktionen zu H_0 seien bekannt:

$$H_0 |n^{(0)}\rangle = E_n^{(0)} |n^{(0)}\rangle \quad \text{mit}$$

$$\langle m^{(0)} | n^{(0)} \rangle = \delta_{mn} \quad \text{und} \quad \sum_n |n^{(0)}\rangle\langle n^{(0)}| = 1$$

λH_1 ist eine kleine Störung zu H_0.

Ziel ist es, das Spektrum von H zu finden, also $H|n\rangle = (H_0 + \lambda H_1)|n\rangle = E_n |n\rangle$

näherungsweise zu lösen.

Wir nehmen an, daß E_n und $|n\rangle$ als Potenzreihe in λ entwickelt werden können:

$$E_n = \sum_{i=0}^{\infty} \lambda^i E_n^{(i)} \; ; \quad |n\rangle = \sum_{i=0}^{\infty} \lambda^i |n^{(i)}\rangle$$

mit $\langle n^{(0)} | n^{(i)}\rangle = 0$ für $i \geq 1$.

(a) Lösung im nicht-entarteten Fall:

setze Reihenentwicklung ein und vergleiche Potenzen in λ:

$$H|n\rangle = E_n|n\rangle \quad \Leftrightarrow$$

$$(H_0 + \lambda H_1) \sum_{i=0}^{\infty} \lambda^i |n^{(i)}\rangle = \sum_{i,j=0}^{\infty} \lambda^i \lambda^j E_n^{(i)} |n^{(j)}\rangle$$

λ^0: $\quad H_0 |n^{(0)}\rangle = E_n^{(0)} |n^{(0)}\rangle$

λ^1: $\quad H_1 |n^{(0)}\rangle + H_0 |n^{(1)}\rangle = E_n^{(0)} |n^{(1)}\rangle + E_n^{(1)} |n^{(0)}\rangle$

λ^2: betrachte nur 1. Ordnung Störungstheorie

Energie:

Multiplikation des Ausdrucks für λ^1 mit $\langle n^{(0)}|$:

$$\langle n^{(0)}|H_1|n^{(0)}\rangle = E_n^{(1)}$$

(allgemein $E_n^{(k)} = \langle n^{(0)}|H_1|n^{(k-1)}\rangle$)

Eigenzustände:

Multiplikation mit $\langle m^{(0)}|$, wobei $m \neq n$:

$$\Rightarrow \quad \langle m^{(0)}|H_1|n^{(0)}\rangle + \underbrace{\langle m^{(0)}|H_0|n^{(1)}\rangle}_{E_m^{(0)}\langle m^{(0)}|n^{(1)}\rangle}$$

$$= \underbrace{\langle m^{(0)}|E_n^{(0)}|n^{(1)}\rangle}_{E_n^{(0)}\langle m^{(0)}|n^{(1)}\rangle} + \underbrace{\langle m^{(0)}|E_n^{(1)}|n^{(0)}\rangle}_{=E_n^{(1)}\underbrace{\delta_{mn}}_{=0 \text{ da } m\neq n}}$$

$$\Rightarrow \langle m^{(0)}|H_1|n^{(0)}\rangle = \langle m^{(0)}|n^{(1)}\rangle\left(E_n^{(0)} - E_m^{(0)}\right)$$

Multiplikation von $\langle m^{(0)}|n^{(1)}\rangle = \dfrac{\langle m^{(0)}|H_1|n^{(0)}\rangle}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}}$

mit $|m^{(0)}\rangle$, Summation über $m \neq n$:

$$\sum_{m\neq n} |m^{(0)}\rangle\langle m^{(0)}|n^{(1)}\rangle = \sum_{m\neq n} |m^{(0)}\rangle \frac{\langle m^{(0)}|H_1|n^{(0)}\rangle}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}}$$

$\langle n^{(0)}|n^{(1)}\rangle = 0 \Rightarrow \sum_{m\neq n}$ kann durch $\sum_m$ ersetzt werden

$$\Rightarrow \boxed{|n^{(1)}\rangle = \sum_{m\neq n} |m^{(0)}\rangle \frac{\langle m^{(0)}|H_1|n^{(0)}\rangle}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}}}$$

(b) Lösung im entarteten Fall:

Entartungsgrad r:

$$H_0 |n,k\rangle^{(0)} = E_n^{(0)} |n,k\rangle^{(0)} \quad \text{mit } k = 1,\dots,r$$

Prozedur:

1) Diagonalisiere die Matrix

$$M_{ij} = {}^{(0)}\langle n,i | H_1 | n,j\rangle^{(0)}$$

2) Die Energien $E_{n,k}^{(1)}$ ergeben sich aus den Eigenwerten dieser Matrix

3) Berechnung der Eigenzustände $|\widetilde{n,k}\rangle^{(0)}$, die Eigenzustände zu H_0 und H_1 sind:

$$|\widetilde{n,k}\rangle^{(0)} = \sum_{i=1}^{r} c_{ik} |n,i\rangle^{(0)}$$

Die c_{ik} müssen unitäre $(r \times r)$-Matrizen sein.

Die c_{ik} werden bestimmt durch die Gleichung

$$\sum_{j=1}^{r} M_{ij}\, c_{jk} = E^{(1)}_{n,k}\, c_{ik}$$

Herleitung:

$$\langle \widetilde{n,l} | H_1 | \widetilde{n,k} \rangle \stackrel{!}{=} \delta_{kl}\, E^{(1)}_{n,k}$$

$$= (c_{il})^* M_{ij}\, c_{jk} = (c^\dagger)_{li} M_{ij}\, c_{jk}$$

Multiplikation mit c_{sl}:

$$\underbrace{c_{sl}\,(c^\dagger)_{li}}_{\delta_{si}} M_{ij}\, c_{jk} \stackrel{!}{=} c_{sl}\, \delta_{kl}\, E^{(1)}_{n,k}$$

$$M_{sj}\, c_{jk} = E^{(1)}_{n,k}\, c_{sk}$$

Zeitentwicklung der Wellenfunktion für zeitunabhängiges H:

$$H|n\rangle = E_n|n\rangle \quad ; \quad \sum_n |n\rangle\langle n| = \mathbb{1}$$

$$|\psi\rangle = \sum_n |n\rangle \underbrace{\langle n|\psi\rangle}_{a_n} = \sum_n a_n |n\rangle$$

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t}|\psi\rangle = H|\psi\rangle \quad \Rightarrow$$

$$i\hbar \sum_n \frac{\partial a_n(t)}{\partial t}|n\rangle = \sum_n a_n(t) E_n |n\rangle$$

$$\Rightarrow \quad a_n(t) = a_n(0)\, e^{-\frac{i}{\hbar}E_n \cdot t}$$

Die Zeitentwicklung der Wellenfunktion ist also gegeben durch

$$|\psi\rangle = \sum_n a_n(0)\, e^{-\frac{i}{\hbar}E_n \cdot t}\, |n\rangle$$

Die Wahrscheinlichkeit, das System im Zustand $|n\rangle$ zu finden, ist zeitunabhängig:

$$\varrho_n = |\langle n|\psi\rangle|^2 = |a_n(0)\, e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t}|^2$$

$$= |a_n(0)|^2$$

Die Energie des Systems ist auch zeitunabhängig:

$$\langle\psi|H|\psi\rangle = \sum_n \varrho_n E_n$$

→ um Übergangsraten für Zerfälle, Streuung, etc berechnen zu können, muß man eine zeitabhängige Störung betrachten.

3.2. Zeitabhängige Störungstheorie

Wir betrachten eine zeitabhängige Störung $V(t)$:

$$H(t) = H_0 + V(t)$$

H_0 zeitunabhängig ; $H_0 |n\rangle = E_n |n\rangle$

Ansatz:

$$|\psi(t)\rangle = \sum_n a_n(t)\, e^{-\frac{i}{\hbar} E_n \cdot t} |n\rangle \quad (1)$$

$$H|\psi(t)\rangle = (H_0 + V(t)) \sum_n a_n(t)\, e^{-\frac{i}{\hbar} E_n \cdot t} |n\rangle$$

$$= \sum_n E_n\, a_n(t)\, e^{-\frac{i}{\hbar} E_n \cdot t} |n\rangle + \sum_n a_n(t)\, e^{-\frac{i}{\hbar} E_n \cdot t} V(t) |n\rangle \quad (2)$$

$$(1) \Rightarrow i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle = \sum_n E_n\, a_n(t)\, e^{-\frac{i}{\hbar} E_n \cdot t} |n\rangle$$

$$+ \sum_n i\hbar \frac{\partial a_n(t)}{\partial t} e^{-\frac{i}{\hbar} E_n \cdot t} |n\rangle \quad (3)$$

(2) $\overset{!}{=}$ (3) $\Rightarrow$ (multiply with $\langle m|$)

$$\sum_n i\hbar \frac{\partial a_n(t)}{\partial t} e^{-\frac{i}{\hbar}E_n \cdot t} |n\rangle =$$

$$\sum_n a_n(t) e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t} V(t)|n\rangle$$

$$\Rightarrow i\hbar \frac{\partial a_m(t)}{\partial t} = \sum_n a_n(t) e^{-\frac{i}{\hbar}(E_n - E_m)\cdot t} \langle m|V(t)|n\rangle$$

formale "Lösung:"

$$a_m(t) = a_m(t_0) + \frac{1}{i\hbar} \sum_n \int_{t_0}^{t} d\tau\, a_n(\tau)\, e^{-\frac{i}{\hbar}(E_n - E_m)\cdot\tau} \cdot \langle m|V(\tau)|n\rangle$$

kann iterativ gelöst werden

Beispiel:

Schwaches Potential, das nur für ein bestimmtes Zeitintervall $\neq 0$ ist. Für $t_0 = -\infty$ sei $V(t) = 0$, das System befinde sich im Eigenzustand $|k\rangle$ von H_0.

$V(t)$ schwaches Potential $\Rightarrow V(t) = \lambda \tilde{V}(t)$,

$\lambda \ll 1$

entwickle auch $a_n(t)$ in λ:

$$a_n(t) = a_n^{(0)} + \lambda a_n^{(1)} + \lambda^2 a_n^{(2)} + \dots$$

$$a_m(t) = a_m(t_0) + \frac{\lambda}{i\hbar} \sum_n \int_{t_0}^{t} d\tau \, a_n(\tau) \, e^{-\frac{i}{\hbar}(E_n - E_m)\cdot\tau} \cdot \langle m | \tilde{V}(\tau) | n \rangle$$

λ^0: $a_m^{(0)}(t) = a_m^{(0)}(t_0) \Rightarrow a_m^{(0)} = \text{const}$

- Ausgangszustand: $|k\rangle$
- gesucht: Übergangswahrscheinlichkeit in einen Zustand $|m\rangle$
- in nullter Ordnung Störungstheorie keine Störung vorhanden, Zustand bleibt gleich

$\Rightarrow a_m^{(0)}(t_0) = \delta_{mk}$

$$\Rightarrow \quad a_m^{(r)}(t_0) = 0 \quad \text{für } r > 0$$ (Wahrscheinlichkeits-erhaltung)

$$\lambda^1: a_m^{(1)}(t) = \frac{1}{i\hbar} \sum_n \int_{t_0}^{t} d\tau \, a_n^{(0)}(\tau) \cdot e^{-\frac{i}{\hbar}(E_n - E_m)\cdot\tau} \langle m|\tilde{V}(\tau)|n\rangle$$

$$= \frac{1}{i\hbar} \sum_n \int_{t_0}^{t} d\tau \, \delta_{nk} \, e^{-\frac{i}{\hbar}(E_n - E_m)\tau} \langle m|\tilde{V}(\tau)|n\rangle$$

$$= \frac{1}{i\hbar} \int_{t_0}^{t} d\tau \, e^{-\frac{i}{\hbar}(E_k - E_m)\cdot\tau} \langle m|\tilde{V}(\tau)|k\rangle$$

$\Rightarrow$ Übergangsamplitude bis 1. Ordnung:

(k umbenannt in n)

$$a_m(t) = \delta_{mn} + \lambda a_m^{(1)}(t)$$

$$= \delta_{mn} + \frac{1}{i\hbar} \int_{t_0}^{t} d\tau \, e^{-\frac{i}{\hbar}(E_n - E_m)\cdot\tau} \cdot \langle m|V(\tau)|n\rangle$$

Übergangswahrscheinlichkeit

(allgemeiner formuliert, in 1. Ordnung Störungstheorie)

Anfangszustand sei bezeichnet mit $|i\rangle$ ("initial"), Endzustand mit $|f\rangle$ ("final"), es sei $|f\rangle \neq |i\rangle$.

Übergangsamplitude:

$$a_{fi}(t) = \frac{1}{i\hbar} \int_{-\infty}^{t} d\tau \, e^{i\omega_{fi}\tau} \langle f|V(\tau)|i\rangle$$

mit $\omega_{fi} = \frac{1}{\hbar}(E_f - E_i)$.

Die Übergangswahrscheinlichkeit ist dann gegeben durch

$$\boxed{\begin{aligned} W_{fi}(t) &= |a_{fi}(t)|^2 \\ &= \frac{1}{\hbar^2}\left|\int_{-\infty}^{t} d\tau\, e^{i\omega_{fi}\tau}\langle f|V(\tau)|i\rangle\right|^2 \end{aligned}}$$

Beispiel: geladenes Teilchen im Oszillator-Potential:

$$H_0 = \frac{p^2}{2m} + \frac{m}{2}\omega^2 x^2$$

Störung: schwaches, zeitabhängiges elektr. Feld

$$\mathcal{E}(t) = E \cdot e^{-\frac{t^2}{\tau^2}}$$

bei $t = -\infty$: Oszillator im Grundzustand.

Wahrscheinlichkeit, bei $t=\infty$ einen angeregten Zustand zu finden:

$$V(t) = -e\,\mathcal{E}(t)\cdot x$$

$$W_{f0} = \frac{e^2 E^2}{\hbar^2} \left| \int_{-\infty}^{\infty} dt \, \langle f | x | 0 \rangle e^{i\omega_{fi} t} e^{-\frac{t^2}{\tau^2}} \right|^2$$

$$= \frac{e^2 E^2}{\hbar^2} \left| \langle f | x | 0 \rangle \right|^2 \cdot \left| I_t \right|^2$$

$$I_t = \int_{-\infty}^{\infty} dt \, e^{i\omega_{fi} t} e^{-\frac{t^2}{\tau^2}} = e^{-\omega_{fi}^2 \frac{\tau^2}{4}} \sqrt{\pi}\,\tau$$

Verwendet: $\int_{-\infty}^{\infty} dx \, e^{-x^2} = \sqrt{\pi}$, quadrat. Ergänzung

mit $x = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (a^+ + a)$ und $\langle 1 | a^+ | 0 \rangle = 1$

finden wir

$$\langle f | x | 0 \rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\, \delta_{f1}$$

$$\Rightarrow W_{f0} = \frac{e^2 E^2}{\hbar} \frac{\pi \tau^2}{2m\omega} e^{-\omega_{fi}^2 \frac{\tau^2}{2}} \delta_{f1}$$

ausgedrückt durch Impulsübertrag ΔP vom elektrischen Feld zum Oszillator,

$$\Delta P = \int_{-\infty}^{\infty} dt\, e \cdot \mathcal{E}(t) = e E \sqrt{\pi}\, \tau :$$

$$W_{f0} = \frac{(\Delta P)^2}{2m\hbar\omega} e^{-\omega_{fi}^2 \frac{\tau^2}{2}} \delta_{f1}$$

Störungstheorie ist nur verwendbar, wenn $W_{f0} \ll 1$. Dazu betrachten wir den Energieübertrag vom elektrischen Feld zum Oszillator.

Für den Zustand $|f\rangle$ bei $t = \infty$ gilt

$$|f\rangle = |0\rangle \cdot \left(1 - \frac{|a_{f0}|^2}{2}\right) + |1\rangle \cdot a_{f0}$$

Energie bei $t = -\infty$: $E_0 = \langle 0 | H_0 | 0 \rangle$

Energie bei $t = \infty$: $E_f = E_0 (1 - W_{f0}) + E_1 W_{f0}$

Energieübertrag:

$$\Delta E = E_f - E_0 = (E_1 - E_0) W_{f0} = \hbar\omega W_{f0}$$

$$= \frac{(\Delta P)^2}{2m} e^{-\omega_{fi}^2 \frac{\tau^2}{2}}$$

$\Rightarrow$ W_{f0} klein für $\Delta E \ll \hbar\omega$

3.3. Zeitentwicklungsoperator

Die Lösung der Schrödingergleichung mit zeitabhängigem Hamiltonoperator $H(t)$,

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi, t\rangle = H(t) |\psi, t\rangle$$

kann formal durch den Zeitentwicklungs-Operator $U(t, t_0)$ ausgedrückt werden. Es gilt

$$|\psi, t\rangle = U(t, t_0) |\psi, t_0\rangle$$

mit $U(t_0, t_0) = \mathbb{1}$ und U unitär.

Einsetzen in die Schrödingergleichung liefert

$$\boxed{i\hbar \frac{\partial U(t,t_0)}{\partial t} = H(t)\, U(t,t_0)}$$

- falls $H(t) = H$ zeitunabhängig:

$$U(t,t_0) = e^{-\frac{i}{\hbar} H\cdot(t-t_0)}$$

- falls $H(t)$ zeitabhängig:

$$U(t,t_0) = 1 - \frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t} dt'\, H(t')\, U(t',t_0)$$

kann iterativ gelöst werden:

$$U(t,t_0) = 1 - \frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t} dt'\, H(t')$$

$$+ \left(\frac{i}{\hbar}\right)^2 \int_{t_0}^{t} dt' \int_{t_0}^{t'} dt''\, H(t')\, H(t'') + \dots$$

Integration über Dreieck

$$\int_{t_0}^{t} dt' \int_{t_0}^{t'} dt'' = \int_{t_0}^{t} dt' \int_{t_0}^{t} dt'' \,\Theta(t'-t'')$$

$$= \frac{1}{2} \int_{t_0}^{t} dt' \int_{t_0}^{t} dt'' \left(\Theta(t'-t'') + \Theta(t''-t') \right)$$

Zeitordnung von H muß gleich bleiben $\Rightarrow$

$$\int_{t_0}^{t} dt' \int_{t_0}^{t'} dt'' \, H(t')\,H(t'') =$$

$$\frac{1}{2} \int_{t_0}^{t} dt' \int_{t_0}^{t} dt'' \begin{cases} H(t')\,H(t'') & \text{für } t' > t'' \\ H(t'')\,H(t') & \text{für } t' \leq t'' \end{cases}$$

Wir definieren den Zeitordnungsoperator T durch

$$T\left(H(t_1)\,H(t_2) \right) = \begin{cases} H(t_1)\,H(t_2) & \text{für } t_1 > t_2 \\ H(t_2)\,H(t_1) & \text{für } t_2 \geq t_1 \end{cases}$$

analog für beliebig viele Argumente.

Damit kann die iterative Lösung für $U(t,t_0)$ dargestellt werden durch

$$\boxed{U(t,t_0) = T \cdot \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t} dt'\, H(t')\right)}$$

3.4. Heisenberg / Schrödinger / Wechselwirkungsbild

Bisher haben wir die Schrödinger-Darstellung von Zuständen und Operatoren verwendet:

Die Zustände sind zeitabhängig, die Operatoren sind zeitunabhängig (außer bei expliziter Zeitabhängigkeit), z. B. $\hat{x}, \hat{p}, \hat{L}$ zeitunabhängig.

Die Zeitabhängigkeit der Zustände wird bestimmt durch

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi, t\rangle_S = H_S |\psi, t\rangle_S$$

$$|\psi, t\rangle_S = e^{-\frac{i}{\hbar} H_S \cdot t} |\psi, 0\rangle_S$$

Physikalische Größen basieren auf Erwartungswerten von Operatoren in Zuständen $\Rightarrow$ die Zeitabhängigkeit kann den Operatoren zugeordnet werden anstatt den Zuständen.

Im Heisenbergbild sind die Zustände $|\psi\rangle$ zeitunabhängig, die Operatoren zeitabhängig (selbst wenn ein Operator im Schrödingerbild zeitunabhängig ist, wird es im Heisenbergbild zeitabhängig).

Heisenbergbild-Operator O_H:

$$\boxed{O_H = U^\dagger(t,t_0)\, O_S\, U(t,t_0)}$$

Heisenberg-Zustand:

$$|\psi\rangle_H = U^\dagger(t,t_0)\,|\psi,t\rangle_S = |\psi,t_0\rangle_S$$

$\Rightarrow$ $|\psi\rangle_H$ ist zeitunabhängig,

$${}_H\langle\psi|O_H|\psi\rangle_H = {}_S\langle\psi,t|O_S|\psi,t\rangle_S$$