Generelle Idee der Störungstheorie

$$\hat H = \hat H_0 + \underbrace{\hat H_1}_{\text{klein}} \qquad \hat H_1 = \lambda \hat V$$

Störoperator

kleiner Parameter

Zeitunabhängig ($\hat H_0$, $\hat H_1$ sind unabh. von t) $\qquad \hat H|n\rangle = E|n\rangle$

Entwickle um das ungestörte System $\quad \hat H_0|n^{(0)}\rangle = E_0|n^{(0)}\rangle$

$$E = E^{(0)} + \lambda E^{(1)} + \dots$$

$$|n\rangle = |n^{(0)}\rangle + \lambda|n^{(1)}\rangle + \dots$$

VII.2. Zeitabhängige Störungstheorie

Problem: $\hat H = \hat H_0 + \hat H_1(t) = \hat H(t)$ $\qquad$ mit $\underbrace{\hat H_0|n^{(0)}\rangle = E_n^{(0)}|n^{(0)}\rangle}_{\text{exakt bekannt}}$

zeitunabhängig

und $\hat H_1(t) = \lambda \hat V(t)$

explizit zeitabhängige Störung

z.B. oszillierendes elektromagnet. Feld

Beachte: $\hat H$ ist nun explizit zeitabhängig

$\Rightarrow$ Energie ist keine Erhaltungsgröße mehr!

$\Rightarrow$ Von Interesse sind <u>nicht</u> die Energieeigenwerte sondern die Zeitentwicklung der <u>Zustände</u>!

Ausgangspunkt:

volle Schrödingergleichung: $\boxed{\hat{H}|\psi(t)\rangle = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\psi(t)\rangle}$

Entwickle $|\psi(t)\rangle$ nach den (zeitunabhängigen) EZ des ungestörten Problems:

$$|\psi(t)\rangle = \underbrace{\sum_{n^0}|n^{(0)}\rangle\langle n^{(0)}|}_{1}\psi(t)\rangle$$

definiere
$c_n(t) = \langle n^{(0)}|\psi(t)\rangle$

$$\Rightarrow |\psi(t)\rangle = \sum_{n^0} c_n(t)\,|n^{(0)}\rangle \quad (*)$$

Annahme zur Anfangsbedingung:

$$|\psi(t=0)\rangle = |k^{(0)}\rangle$$

aus (*) folgt dann: $c_n(t=0) = c_n(0) = \delta_{nk}$

Setze (*) in die volle SG ein:
$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\psi\rangle = \hat{H}|\psi\rangle$

$$\Rightarrow i\hbar \sum_{n^0} \frac{d}{dt} c_n(t)\, |n^{(0)}\rangle$$

$$= \sum_{n^0} c_n(t) \Big(\underbrace{\hat{H}_0 |n^{(0)}\rangle}_{E_n^{(0)} |n^{(0)}\rangle} + \hat{H}_1(t) |n^{(0)}\rangle \Big)$$

multipliziere von links mit $\langle m^{(0)}|$ und benutze $\langle m^{(0)}|n^{(0)}\rangle = \delta_{mn}$

$$\Rightarrow \quad i\hbar \frac{d}{dt} c_m(t) = \sum_{n^{(0)}} c_n(t) \Big(\overbrace{\langle m^{(0)}| E_n^{(0)} |n^{(0)}\rangle}^{E_n^{(0)}\delta_{mn}} + \langle m^{(0)}| \hat{H}_1(t) |n^{(0)}\rangle \Big)$$

$$(**) \qquad = E_m^{(0)} c_m(t) + \sum_{n^0} c_n(t) \langle m^{(0)}| \hat{H}_1(t) |n^{(0)}\rangle$$

Umschreiben von $(**)$: $\quad \boxed{|\psi(t)\rangle = \sum_n c_n(t) |n^{(0)}\rangle}$

$$c_n(t) = e^{-\frac{i}{\hbar} E_n^{(0)} t} \underbrace{g_n(t)}_{\text{Korrekturfaktor!}}$$

Hintergrund: Im ungestörten System gilt

$$|\psi^{(0)}(t)\rangle = |n^{(0)}\rangle e^{-iE_n^{(0)}t/\hbar}$$

$$\Leftrightarrow g_n(t) = c_n(t)\, e^{+\frac{i}{\hbar} E_n^{(0)} t} \quad \text{exakt}$$

und $$\frac{d}{dt} c_n(t) = -\frac{i}{\hbar} E_n^{(0)} c_n(t) + e^{-iE_n^{(0)}t/\hbar} \frac{d}{dt} g_n(t)$$

Einsetzen in (**)

$$\cancel{E_m^{(0)} c_m(t)} + i\hbar \frac{d}{dt} g_m(t) e^{-\frac{i}{\hbar} E_m^{(0)} t} = \cancel{E_m^{(0)} c_m(t)} + \sum_{n^0} e^{-\frac{i}{\hbar} E_n^{(0)} t} g_n(t) \langle m^{(0)} | \hat{H}_1 | n^{(0)} \rangle$$

$$\Rightarrow i\hbar \frac{d}{dt} g_m(t) = \sum_{n^0} \left(e^{\frac{i}{\hbar}(E_m^{(0)} - E_n^{(0)})t} \cdot g_n(t) \langle m^{(0)} | \hat{H}_1(t) | n^{(0)} \rangle \right)$$

bisher wurde nichts genähert!

Satz von exakten gekoppelten Differentialgleichungen 1. Ordnung für die Funktionen $g_m(t)$

mit Anfangsbedingungen:

$$g_m(t=0) = c_m(t=0) \cdot \underbrace{e^{\frac{i}{\hbar} E_m^{(0)} \cdot 0}}_{1}$$

$$= \delta_{mk}$$

Weiteres Vorgehen:

Entwickle $g_n(t)$ nach Potenzen des Störparameters λ !

$$g_n(t) = g_n^{(0)}(t) + \lambda g_n^{(1)}(t) + \lambda^2 g_n^{(2)}(t) + O(\lambda^3)$$

$\boxed{\hat{H}_1 = \lambda \hat{V}}$

Einsetzen in die exakte Gleichung für die $g_n(t)$:

$$i\hbar \frac{d}{dt} g_m^{(0)}(t) + \lambda\, i\hbar \frac{d}{dt} g_m^{(1)}(t) + \lambda^2\, i\hbar \frac{d}{dt} g_m^{(2)}(t) + O(\lambda^3)$$
$$= \sum_{n^0} e^{\frac{i}{\hbar}(E_m^{(0)} - E_n^{(0)})t} \Big(\lambda \langle m^{(0)} | \hat{V}(t) | n^{(0)} \rangle g_n^{(0)}(t)$$
$$+ \lambda^2 \langle m^{(0)} | \hat{V}(t) | n^{(0)} \rangle g_n^{(1)}(t)$$
$$+ O(\lambda^3) \Big)$$

Koeffizientenvergleich für Terme der Ordnung λ^p

$p = 0$

(nullte Ordnung)

$$i\hbar \frac{d}{dt} g_m^{(0)}(t) = 0 \quad \Rightarrow \quad g_m^{(0)}(t) = \text{const}$$

Genauer: Wir wissen, daß für das ungestörte Problem ($\lambda = 0$) gilt:

$$|\psi(t)\rangle = \sum_{n^0} c_n^0(t) |n^{(0)}\rangle$$

mit $c_n^0(t) = e^{-\frac{i}{\hbar} E_n^{(0)} t} \delta_{nk}$

Folgerung:
$$g_m^{(0)}(t) = e^{\frac{i}{\hbar} E_m^{(0)} t} c_m^0(t)$$
$$= \delta_{m,k}$$

$(\Rightarrow c_n(t=0) = \delta_{nk}$ wie gefordert$)$

$p=1$ aus Koeffizientenvergleich:

(1. Ordnung)

$$i\hbar \frac{d}{dt} g_m^{(1)}(t) = \sum_{n^0} e^{\frac{i}{\hbar}(E_m^{(0)}-E_n^{(0)})t} \cdot \underbrace{g_n^{(0)}(t)}_{\delta_{n,k}} \cdot \langle m^{(0)}|\hat{V}(t)|n^{(0)}\rangle$$

$$i\hbar \frac{d}{dt} g_m^{(1)}(t) = e^{\frac{i}{\hbar}(E_m^{(0)}-E_k^{(0)})t} \langle m^{(0)}|\hat{V}(t)|k^{(0)}\rangle$$

Diff.gleichung 1. Ordnung in der Zeit für die Korrekturen 1. Ordnung $g_m^{(1)}(t)$

Anfangsbedingung:

man weiß: $|\psi(t=0)\rangle = |k^{(0)}\rangle$

$\rightarrow g_n^{(1)}(t=0)=0$

$$\Rightarrow g_m^{(1)}(t) = \frac{1}{i\hbar}\int_0^t dt'\, e^{\frac{i}{\hbar}(E_m^{(0)}-E_k^{(0)})t'} \cdot \langle m^{(0)}|\hat{V}(t')|k^{(0)}\rangle$$

Korrekturen 1. Ordnung zur Zeitentwicklung des Systems mit Störung

$$|\psi(t)\rangle = \sum_{n^0} c_n(t)\,|n^{(0)}\rangle$$

$$= \sum_{n^0} e^{-\frac{i}{\hbar}E_n^{(0)}t}\, g_n(t)\,|n^{(0)}\rangle \qquad \text{exakt}$$

$$\approx \sum_{n^0} e^{-\frac{i}{\hbar}E_n^{(0)}t}\,\big(\underbrace{g_n^{(0)}(t)}_{\delta_{nk}} + \lambda\, g_n^{(1)}(t)\big)\,|n^{(0)}\rangle$$

Betrachte nun die sogenannte

<u>Übergangswahrscheinlichkeit</u>

→ Wahrsch., zur Zeit t den Zustand $|m^{(0)}\rangle$ zu finden, wenn für $t=0$ der Zustand $|k^{(0)}\rangle$ vorlag

Idee: Störung $\hat{V}(t)$ wirkt nur für eine begrenzte Zeit; vor und nach dieser Zeit ist das System dementsprechend durch $\hat{H}_0$ bestimmt und wird daher (z.B. bei Messung der Energie) in einem der EZ von $\hat{H}_0$ sein!

Definition:

Übergangswahrsch.

$$w_{mk} := |\langle m^{(0)}|\psi(t)\rangle|^2$$

mit $|\psi(t)\rangle = \sum_{n^0} c_n(t)\,|n^{(0)}\rangle$

und $c_n(t=0) = \delta_{nk}$

k^0 - Abhängigkeit steckt also nur in den Anfangsbedingungen!

$$\Rightarrow w_{mk} = \Big|\sum_{n^0} c_n(t)\underbrace{\langle m^{(0)}|n^{(0)}\rangle}_{\delta_{mn}}\Big|^2 = |c_m(t)|^2$$

$$= |g_m(t)|^2$$

Erinnerung:
$$c_m(t) = e^{-\frac{i}{\hbar}E_m^{(0)}t}\, g_m(t)$$

~~Hier~~ betrachte nun noch die niedrigsten Ordnungen.

$m=k$: $\quad g_m(t) = g_k(t)$

$$\simeq g_k^{(0)}(t) = 1$$

$$\longrightarrow w_{kk} = |1|^2 = 1$$

$m \neq k$ $\quad g_m(t) = \lambda\, g_m^{(1)}(t) \longrightarrow w_{mk} = \lambda^2\, |g_m^{(1)}(t)|^2$

(es gibt wg. Anfangsbedingung
keinen Term nullter Ordnung)