5. Näherungsmethoden

5.1 Zeitabhängige Störungsrechnung (Dirac)

Es soll die zeitliche Entwickl. eines Zustandes $|\psi\rangle_t$ aus der Schrödingergl.

$$\hat{H}|\psi\rangle_t = i\hbar \frac{\partial}{\partial t}|\psi\rangle_t$$

berechnet werden, wobei

$$\hat{H} = \hat{H}^0 + \hat{H}^1(t)$$

Störung $\hat{H}^1 = \varepsilon \hat{V}$ mit kleinem Par. $\varepsilon \in \mathbb{R}$
evtl. explizit zeitabh.

Eigenwerte und -zustände von $\hat{H}^0$ seien bekannt:

$$\boxed{\hat{H}^0|n\rangle = E_n|n\rangle}$$ ungestörtes Problem (diskretes Spektrum)

$$\langle n|n'\rangle = \delta_{nn'}$$
$$\sum_n |n\rangle\langle n| = 1$$

Entwicklung von $|\psi\rangle_t$ nach den ungestörten Eigenzuständen $|n\rangle$:

$$|\psi\rangle_t = \sum_n |n\rangle \underbrace{\langle n|\psi\rangle_t}_{c_n(t)} = \sum_n c_n(t)|n\rangle$$

Anfangsbed. sei ein ungestörter Eigenzustand $|n_0\rangle$:

$$|\psi\rangle_{t=0} = |n_0\rangle \quad \Rightarrow \quad c_n(0) = \delta_{nn_0}$$

Zeitentwicklung unter dem Einfluss der Störung:

$$i\hbar \sum_n \frac{dc_n}{dt}|n\rangle = \sum_n c_n(t)\left(\underbrace{\hat{H}^0|n\rangle} + \hat{H}^1(t)|n\rangle\right)$$

Linksmult. mit $\langle m|$:

$$i\hbar \frac{dc_m}{dt} = \overbrace{E_m}^{E_n|n\rangle} c_m(t) + \sum_n \langle m|\hat{H}^1|n\rangle c_n(t) \qquad (*)$$

Def. $g_n(t)$ durch $c_n(t) = \underbrace{e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t}}_{\text{zeitentw. der ungestörten Zust.}} g_n(t)$

(Lös. von (*) für $\varepsilon=0$)

$$\rightarrow i\hbar \frac{dc_m}{dt} = E_m c_m(t) + e^{-\frac{i}{\hbar}E_m t}\, i\hbar \frac{dg_m}{dt}$$

in (*) :

$$\boxed{i\hbar \frac{dg_m}{dt} = \sum_n \exp\left\{\frac{i(E_m-E_n)t}{\hbar}\right\} \langle m|\hat{H}^1|n\rangle g_n(t)}$$

Störungsentwicklung für kleines ε mit $\hat{H}^1 = \varepsilon \hat{V}$:

$$g_n(t) = g_n^{(0)}(t) + \varepsilon g_n^{(1)}(t) + \varepsilon^2 g_n^{(2)}(t) + \ldots$$

Koeffizientenvergleich in Ordnung ε^ν :

$\nu=0$: $i\hbar \frac{dg_m^{(0)}}{dt} = 0 \Rightarrow \boxed{g_m^{(0)}(t) = \text{const.} \overset{!}{=} \delta_{mn_0}}$

$\nu=1$:
$$i\hbar \frac{dg_m^{(1)}}{dt} = \sum_n \exp\left\{\frac{i(E_m-E_n)t}{\hbar}\right\} \langle m|\hat{V}|n\rangle \underbrace{g_n^{(0)}}_{\delta_{nn_0}}$$
$$= \exp\left\{\frac{i(E_m-E_{n_0})t}{\hbar}\right\} \langle m|\hat{V}|n_0\rangle$$

Anf. bed. $g_n^{(1)}(0)=0$

$$\Rightarrow \boxed{g_m^{(1)}(t) = \frac{1}{i\hbar}\int_0^t d\tau \exp\left\{\frac{i(E_m-E_{n_0})\tau}{\hbar}\right\} \langle m|\hat{V}|n_0\rangle}$$

Übergangswahrscheinlichkeit

Wahrsch., zur Zeit t den Zust. $|n\rangle$ zu finden, wenn für $t=0$ $|n_0\rangle$ vorlag:

$$|\langle n|\psi\rangle_t|^2 = \Big|\sum_{n'} c_{n'}(t)\underbrace{\langle n|n'\rangle}_{\delta_{nn'}}\Big|^2 = |c_n(t)|^2 = |g_n(t)|^2$$

Näherung: niedrigste, nicht verschwindende Ordn. der Stör. rechn.

$$g_n(t) = \begin{cases} g_n^{(0)} = \delta_{nn_0} = 1 & \text{für } n = n_0 \\ \varepsilon g_n^{(1)} & \text{für } n \neq n_0 \end{cases}$$

(a) **zeitunabh. Störung**: $\hat{V} = \text{const.}$

$$g_n^{(1)}(t) = -\frac{i}{\hbar}\int_0^t d\tau \exp\left\{\frac{i(E_n - E_{n_0})\tau}{\hbar}\right\} \langle n|\hat{V}|n_0\rangle$$

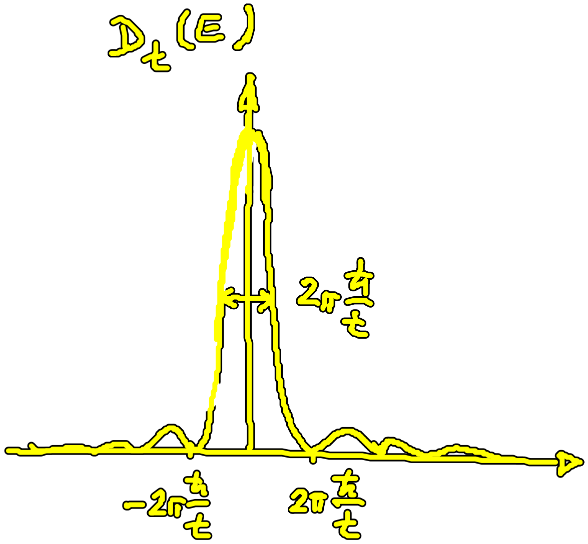
$$= -\langle n|\hat{V}|n_0\rangle \frac{\exp\left\{\frac{i(E_n-E_{n_0})t}{\hbar}\right\} - 1}{E_n - E_{n_0}}$$

$$|g_n^{(1)}(t)|^2 = |\langle n|\hat{V}|n_0\rangle|^2 \frac{(e^{-i\Omega t}-1)(e^{i\Omega t}-1)}{\hbar^2\Omega^2}$$

$\Omega := \frac{E_n - E_{n_0}}{\hbar}$ **Übergangs-frequenz**

$$= |\langle n|\hat{V}|n_0\rangle|^2 \frac{2(1-\cos\Omega t)}{\hbar^2\Omega^2}$$

$$= |\langle n|\hat{V}|n_0\rangle|^2 \frac{4\sin^2\left(\frac{\Omega}{2}t\right)}{\hbar^2\Omega^2}$$



$$=: D_t(E_n - E_{n_0})$$

$$D_t(0) = \left(\frac{t}{\hbar}\right)^2 \xrightarrow{t\to\infty} \infty \qquad \left(\frac{\sin x}{x}\right)^2$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} dE\, D_t(E) = \int_{-\infty}^{\infty} dE\, \frac{4}{E^2} \sin^2\frac{Et}{2\hbar}$$

$$= \frac{2t}{\hbar} \underbrace{\int_{-\infty}^{\infty} d\xi\, \frac{\sin^2\xi}{\xi^2}}_{\pi}$$

Also $D_t(E) =: \frac{2\pi}{\hbar} t\, \delta_t(E) \xrightarrow[t\to\infty]{} \frac{2\pi}{\hbar} t\, \delta(E)$

$$\Longrightarrow \boxed{|\langle n|\psi_t\rangle|^2 = |g_n(t)|^2 \approx \frac{2\pi}{\hbar} |\langle n|\hat{H}^1|n_0\rangle|^2\, t\, \delta_t(E_n - E_{n_0})}$$

für $t \to \infty$: Energieerhaltung $E_n - E_{n_0} = 0$

für $t < \infty$ hat $D_t(E)$ die Breite $\Delta E \approx \frac{2\pi\hbar}{t}$

$\Rightarrow$ Energie-Zeit-Unschärferelation $\boxed{\Delta E \cdot t \approx 2\pi\hbar}$

Übergangswahrsch. pro Zeiteinheit (von n_0 nach n):

$$\boxed{W_{nn_0} = \frac{d}{dt} |\langle n|\psi\rangle_t|^2 = \frac{2\pi}{\hbar} |\langle n|\hat{H}^1|n_0\rangle|^2\, \delta(E_n - E_{n_0})}$$

(Fermi's goldene Regel; Störungstheorie 1. Ordnung für $t \to \infty$

(b) Harmon. zeitabh. Störung

$$\hat{H}^1(t) = \hat{F} e^{-i\omega t} + \hat{F}^+ e^{i\omega t} \qquad \text{(hermitesch!)}$$

$$g_n(t) = -\frac{i}{\hbar} \int_0^t d\tau\, \exp\left\{\frac{i(E_n - E_{n_0} - \hbar\omega)\tau}{\hbar}\right\} \langle n|\hat{F}|n_0\rangle$$

$$- \frac{i}{\hbar} \int_0^t d\tau\, \exp\left\{\frac{i(E_n - E_{n_0} + \hbar\omega)\tau}{\hbar}\right\} \langle n|\hat{F}^+|n_0\rangle$$

$$= -\langle n|\hat{F}|n_0\rangle \frac{\exp\{\frac{i}{\hbar}(E_n-E_{n_0}-\hbar\omega)t\}-1}{E_n-E_{n_0}-\hbar\omega}$$

$$-\langle n|\hat{F}^+|n_0\rangle \frac{\exp\{\frac{i}{\hbar}(E_n-E_{n_0}+\hbar\omega)t\}-1}{E_n-E_{n_0}+\hbar\omega}$$

$$|\langle n|\psi\rangle_t|^2 = |g_n|^2 = \frac{2\pi}{\hbar}|\langle n|\hat{F}|n_0\rangle|^2 t\,\delta(E_n-E_{n_0}-\hbar\omega)$$

$$+\frac{2\pi}{\hbar}|\langle n|\hat{F}^+|n_0\rangle|^2 t\,\delta(E_n-E_{n_0}+\hbar\omega)$$

gemischte Terme oszillieren für $\omega \neq 0$, $\Omega \neq 0$, für $t\to\infty$ vernachlässigbar gegen $\sim t\,\delta(\hbar\Omega^\pm)$

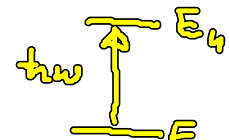
$$+\underbrace{\langle n|\hat{F}|n_0\rangle^*\langle n|\hat{F}^+|n_0\rangle}_{Ae^{-i\vartheta}}\frac{(e^{-i\Omega^- t}-1)(e^{i\Omega^+ t}-1)}{\hbar^2\Omega^-\Omega^+}$$

$$+\underbrace{\langle n|\hat{F}^+|n_0\rangle^*\langle n|\hat{F}|n_0\rangle}_{Ae^{i\vartheta}}\frac{(e^{-i\Omega^+ t}-1)(e^{i\Omega^- t}-1)}{\hbar^2\Omega^-\Omega^+}$$

mit $\Omega^\pm := \Omega \pm \omega = \frac{E_n - E_{n_0} \pm \hbar\omega}{\hbar}$

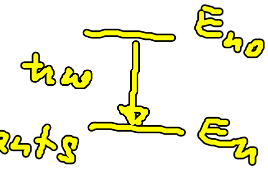
<u>Übergangswahrscheinlichkeit pro Zeit</u> für $t\to\infty$ von n_0 nach n:

$$W_{nn_0} = \frac{2\pi}{\hbar}|\langle n|\hat{F}|n_0\rangle|^2\,\delta(E_n-E_{n_0}-\hbar\omega)$$



Absorption eines Quants $\hbar\omega$

$$+\frac{2\pi}{\hbar}|\langle n_0|\hat{F}|n\rangle|^2\,\delta(E_n-E_{n_0}+\hbar\omega)$$



Emission eines Quants