Zeitabhängige Störungstheorie

Bisher haben wir uns mit einer Zerlegung des Hamilton-Operators in einen Einteilchen- und einen Wechselwirkungsanteil begnügt, $H = H_0 + H_{WW}$. Im Falle expliziter Zeitabhängigkeit könnten damit nur Eigenwerte und Eigenzustände zu festen Zeitpunkten berechnet werden.

Jetzt soll hingegen eine Aufspaltung in einen zeitlich konstanten und einen zeitabhängigen Anteil erfolgen,

$$H = H_0 + \lambda H_1(t),$$

wobei letzterer als Störung $(\lambda < 1)$ betrachtet werden soll. Die Idee ist, Eigenzustände nur von H_0 allein zu untersuchen und festzustellen, welche Übergänge zwischen ihnen durch $H_1(t)$ angeregt werden; speziell geht es um Übergangswahrscheinlichkeiten zwischen festen Zuständen,

$$\underset{(t=0)}{|i\rangle} \xrightarrow{P_{if}(t)} \underset{(t>0)}{|f\rangle} .$$

Wir betrachten nur den diskreten Fall: Seien die Zustände $|n\rangle$, $n \in \mathbb{N}_0$, Eigenzustände von H_0, $H_0|n\rangle = E_n|n\rangle$. Dann soll sich der gestörte Zustand zu jeder Zeit in diese Zustände entwickeln lassen:

$$|\psi(t)\rangle = \sum_n c_n(t)\,|n(t)\rangle = \sum_n c_n(t)\,\underbrace{e^{-itH_0}|n\rangle}_{\text{Zeitentwicklung des ungestörten Systems } (\hbar = 1)}$$

$$= \sum_n c_n(t)\, e^{-iE_n t}|n\rangle .$$

Diese Entwicklung ist in die Schrödinger-Gleichung einzusetzen.

$$i\,\partial_t |\psi(t)\rangle = \left(H_0 + \lambda H_1(t)\right)|\psi(t)\rangle$$

$$i \sum_n \dot{c}_n(t)\, e^{-iE_n t}\, |n\rangle + \cancel{\sum_n E_n c_n(t)\, e^{-iE_n t}\, |n\rangle}$$

$$= \cancel{\sum_n c_n(t)\, e^{-iE_n t}\, \underbrace{H_0 |n\rangle}_{E_n |n\rangle}} + \lambda \sum_n c_n(t)\, e^{-iE_n t}\, H_1(t)\, |n\rangle$$

Multiplikation von links mit $\langle m|\, e^{iE_m t}$ gibt mit $\langle m|n\rangle = \delta_{mn}$:

$$\underset{\sim}{i\,\dot{c}_m(t) = \lambda \sum_n c_n(t)\, \langle m|H_1(t)|n\rangle\, e^{i(E_m - E_n)t}} \qquad (*)$$

Weiterhin soll sich $c_n(t)$ in eine Reihe entwickeln lassen,

$$c_n(t) = c_n^{(0)}(t) + c_n^{(1)}(t) + c_n^{(2)}(t) + \ldots,$$

wobei $c^{(k)}(t) \sim \mathcal{O}(\lambda^k)$. Da die nullte Näherung bedeutet, dass sich nichts verändert, also das System im Zustand $|i\rangle$ verbleibt, gilt

$$c_n^{(0)}(t) = \delta_{ni}\,.$$

Nach dem Einsetzen der Reihe in $(*)$,

$$i\dot{c}_m^{(1)}(t) + i\dot{c}_m^{(2)}(t) + \ldots = \lambda \sum_n \left(\delta_{ni} + c_n^{(1)}(t) + c_n^{(2)}(t) + \ldots\right) \langle m|H_1(t)|n\rangle\, e^{i(E_m - E_n)t},$$

können jeweils Terme gleicher Ordnung in λ verglichen werden; in Ordnung λ^1 erhält man

$$i\,\dot{c}_m^{(1)}(t) = \lambda \langle m|H_1(t)|i\rangle\, e^{i(E_m - E_i)t} \qquad \Big|\int dt$$

$$\longrightarrow \quad c_m^{(1)}(t) = -i\lambda \int_0^t dt_1\, \langle m|H_1(t_1)|i\rangle\, e^{i(E_m - E_i)t_1}$$

$$\Rightarrow \qquad c_m(t) = \delta_{mi} - i\lambda \int_0^t dt_1 \, \langle m | H_1(t_1) | i \rangle \, e^{i(E_m - E_i)t_1} + \mathcal{O}(\lambda^2) .$$

Das Ergebnis kann nun iterativ in (*) eingesetzt werden; in Ordnung λ^2 ist

$$i \, \dot{c}_m^{(2)}(t) = \lambda \sum_n c_n^{(1)}(t) \, \langle m | H_1(t) | n \rangle \, e^{i(E_m - E_n)t}$$

$$\longrightarrow \quad c_m^{(2)}(t) = -i\lambda \sum_n \int_0^t dt_2 \; c_n^{(1)}(t_2) \, \langle m | H_1(t_2) | n \rangle \, e^{i(E_m - E_n)t_2}$$

$$= (-i\lambda)^2 \sum_n \int_0^t dt_2 \int_0^{t_2} dt_1 \, \langle m | H_1(t_2) | n \rangle \langle n | H_1(t_1) | i \rangle \, e^{i(E_m - E_n)t_2} \, e^{i(E_n - E_i)t_1}$$

$$\Rightarrow \quad c_m(t) = \delta_{mi} + (-i\lambda) \int_0^t dt_1 \, \langle m | H_1(t_1) | i \rangle \, e^{i(E_m - E_i)t_1}$$

$$+ (-i\lambda)^2 \sum_n \int_0^t dt_2 \int_0^{t_2} dt_1 \, \langle m | H_1(t_2) | n \rangle \langle n | H_1(t_1) | i \rangle \, e^{i(E_m - E_n)t_2} \, e^{i(E_n - E_i)t_1}$$

$$+ \mathcal{O}(\lambda^3) .$$

Man wiederhole das Verfahren bis zur gewünschten Ordnung und setze am Ende $m = f$, um die gesuchte Übergangswahrscheinlichkeit zu erhalten,

$$P_{if}(t) = |c_f(t)|^2 .$$

<u>Bem.</u> Das Verfahren ist nicht notwendigerweise konvergent (meist handelt es sich nur um ein sog. asymptotisches Verhalten). Die Näherung ist sicher zusammengebrochen, wenn $P_{if} > 1$.

Bsp. Anstoßen des harmonischen Oszillators

Der harmonische Oszillator sei zur Zeit $t \to -\infty$ in seinem Grundzustand $|0\rangle$ präpariert und werde durch das zeitabhängige Potential

$$V(t) = -eEx\, e^{-t^2/\tau^2}$$

(mit Ortsoperator x) gestört. Gesucht ist die Wahrscheinlichkeit, den Oszillator für $t \to \infty$ im ersten angeregten Zustand $|1\rangle$ vorzufinden.

$$c_1^{(1)}(t) = -i \int_{t_0}^{t} dt' \, \langle 1 | V(t') | 0 \rangle \, e^{i(E_1 - E_0)t'}$$

$\leftarrow$ $E_1 - E_0 = \omega$, aus $E_n = \omega(n + \frac{1}{2})$

$$= ieE \int_{t_0}^{t} dt' \, e^{i\omega t'} e^{-t'^2/\tau^2} \underbrace{\langle 1 | x | 0 \rangle}_{= \frac{1}{\sqrt{2m\omega}}}$$

$\leftarrow$ $x = \frac{1}{\sqrt{2m\omega}}(a + a^\dagger)$, $a|0\rangle = 0$, $a^\dagger|0\rangle = |1\rangle$

$$= \frac{ieE}{\sqrt{2m\omega}} \int_{t_0}^{t} dt' \, e^{i\omega t' - \frac{t'^2}{\tau^2}} = \frac{ieE}{\sqrt{2m\omega}} \sqrt{\pi}\, \tau \, e^{-\frac{\omega^2 \tau^2}{4}}$$

für $t_0 \to -\infty$, $t \to \infty$

$$\Rightarrow \quad P_{|0\rangle \to |1\rangle} = |c_1^{(1)}|^2 = \underline{\underline{\frac{\pi e^2 E^2}{2m} \frac{\tau^2}{\omega} e^{-\frac{\omega^2 \tau^2}{2}}}}$$

Die Wahrscheinlichkeit nimmt für $\tau = \frac{1}{\omega}$ ihren größten Wert an.

Würden wir uns außerdem für den Übergang $|0\rangle \rightarrow |2\rangle$ interessieren, erhielten wir

$$c_2^{(1)}(t) = ieE \int_{t_0}^{t} dt' \, e^{2i\omega t'} \, e^{-t'^2/\tau^2} \underbrace{\langle 2|x|0\rangle}_{\sim \langle 2|a+a^\dagger|0\rangle \, = \, \langle 2|1\rangle \, = \, 0.}$$

Das heißt: Hierfür würde eine Störungsrechnung zu zweiter Ordnung benötigt.