Generelle Idee der Störungstheorie

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \underbrace{\hat{H}_1}_{\text{klein}}$$

$\hat{H}_1 = \lambda \hat{V}$ ← Störoperator

Kleiner Parameter

Zeitunabhängig ($\hat{H}_0, \hat{H}_1$ sind unabh. von t) $\hat{H}|n\rangle = E|n\rangle$

Entwickle um das ungestörte System $\hat{H}_0|n^{(0)}\rangle = E_0|n^{(0)}\rangle$

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

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

VII.2. Zeitabhängige Störungstheorie

Problem: $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_1(t) = \hat{H}(t)$ 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

⇒ Energie ist keine Erhaltungsgröße mehr!

⇒ Von Interesse sind nicht die Energieeigenwerte sondern die Zeitentwicklung der Zustände!

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:

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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 (**)

$$\cancel{E_m^{(0)} c_m(t)} + i\hbar \frac{d}{dt} g_m(t) e^{-\frac{i}{\hbar} E_m^{(0)} t} = \cancel{E_m^{(0)} c_m(t)} + \sum_{n^0} e^{-\frac{i}{\hbar} E_n^{(0)} t} g_n(t) \langle m^{(0)} | H_1 | n^{(0)} \rangle$$

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

bisher wurde nichts genähert!

Satz von exakten $\overbrace{\text{Differentialgleichungen}}^{\text{gekoppelten}}$ 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 $g_n(t)$:

$$i\hbar \frac{d}{dt} g_m^{(0)}(t) + \lambda\, i\hbar \frac{d}{dt} g_m^{(1)}(t) + \lambda^2\, i\hbar \frac{d}{dt} g_m^{(2)}(t) + O(\lambda^3)$$

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

Koeffizienten~~ten~~vergleich für Terme der Ordnung λ^p

$\underline{p=0}$

(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:

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

$$\text{mit } c_n^0(t) = e^{-i/\hbar E_n^{(0)} t} \delta_{n,k}$$

Folgerung: $g_m^{(0)}(t) = e^{i/\hbar E_m^{(0)} t} c_m^{(0)}(t)$

$= \delta_{m,k}$

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

$\underset{\sim}{p=1}$ aus Koeffizientenvergleich:

(1. Ordnung)

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

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

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

Anfangsbedingung:

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

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

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

Korrektur 1. Ordnung zur Zeitentwicklung des Systems mit Störung

$$|\psi(t)\rangle = \sum_{n^0} c_n(t)\,|n^{(0)}\rangle$$
$$= \sum_{n^0} e^{-i/\hbar\, E_n^{(0)} t}\, g_n(t)\,|n^{(0)}\rangle \qquad \text{exakt}$$
$$\approx \sum_{n^0} e^{-i/\hbar\, E_n^{(0)} t}\,\Big(\underbrace{g_n^{(0)}(t)}_{\delta_{nk}} + \lambda\, g_n^{(1)}(t)\Big)|n^{(0)}\rangle$$

Betrachte nun die sogenannte
Übergangswahrscheinlichkeit

→ 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 der Anfangsbedingung!

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

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

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

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

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

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

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

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

(es gibt wg. Anfangsbedingung
keinen Term nullter Ordng)