

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

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

$$\hat{H}^0 |n\rangle = E_n |n\rangle$$

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

$$\sum_n |n\rangle \langle n| = 1$$

ungestörtes Problem
(diskretes Spektrum)

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 $|n_0\rangle$:

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

Zeitentwicklung unter dem Einfluss der Störung:

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

links mult. mit $\langle m |$:

$$E_n |n\rangle$$

$$i\hbar \frac{dc_m}{dt} = E_m c_m(t) + \sum_n \langle m | \hat{H}' | n \rangle c_n(t) \quad (*)$$

Def. $g_n(t)$ durch $c_n(t) = \underbrace{e^{-\frac{i}{\hbar} E_n t}}_{\text{zeitentw. der ungestörten Zeit.}} g_n(t)$
(Lös. von (*) für $\epsilon=0$)

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

in (*):

$$i\hbar \frac{dg_m}{dt} = \sum_n \exp\left\{\frac{i(E_m - E_n)t}{\hbar}\right\} \langle m | \hat{H}' | n \rangle g_n(t)$$

Störungsentwicklung für kleines ϵ mit $\hat{H}' = \epsilon \hat{V}$:

$$g_n(t) = g_n^{(0)}(t) + \epsilon g_n^{(1)}(t) + \epsilon^2 g_n^{(2)}(t) + \dots$$

Koeffizientenvergleich in Ordnung ϵ^v :

$$\underline{v=0} : i\hbar \frac{dg_m^{(0)}}{dt} = 0 \quad \Rightarrow \quad g_m^{(0)}(t) = \text{const.} = \delta_{mn_0}$$

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

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

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

Übergangswahrscheinlichkeit

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

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

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

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

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

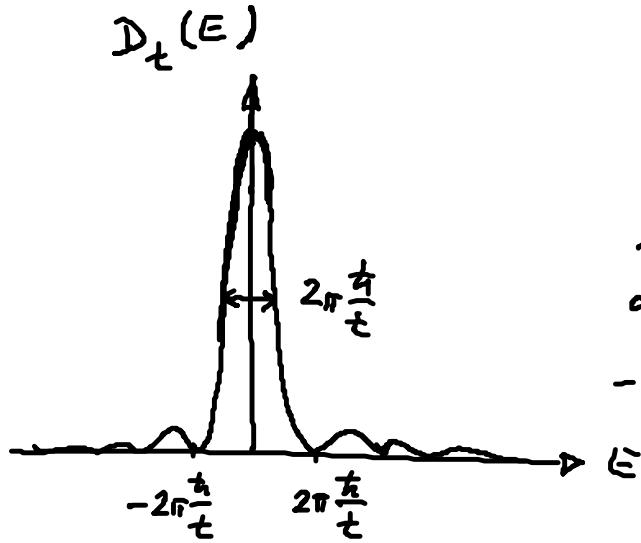
$$g_n^{(1)}(t) = -\frac{i}{\hbar} \int_0^t d\tau \exp\left\{ \frac{i(E_n - E_{n_0})\tau}{\hbar} \right\} \langle n | \hat{V} | n_0 \rangle$$
$$= -\langle n | \hat{V} | n_0 \rangle \frac{\exp\left\{ \frac{i(E_n - E_{n_0})t}{\hbar} \right\} - 1}{E_n - E_{n_0}}$$

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

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

Übergangsfrequenz

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



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

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

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

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

$$\text{Also } D_t(E) =: \frac{2\pi}{\hbar} t \delta_t(E) \xrightarrow{t \rightarrow \infty} \frac{2\pi}{\hbar} t \delta(E) \quad \pi$$

$$\Rightarrow |\langle n | \psi_t \rangle|^2 = |g_n(t)|^2 \approx \frac{2\pi}{\hbar} |\langle n | \hat{H}' | n_0 \rangle|^2 t \delta_t(E_n - E_{n_0})$$

Für $t \rightarrow \infty$: Energieerhaltung $E_n - E_{n_0} = 0$

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

Energie - Zeit - Unschärferelation $\Delta E \cdot t \approx 2\pi\hbar$

Übergangswahrsch. pro Zeiteinheit (von n_0 nach n):

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

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

(b) Harmon. zeitabh. Störung

$$\hat{H}'(t) = \hat{F} e^{-i\omega t} + \hat{F}^+ e^{i\omega t} \quad (\text{hermitesch!})$$

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

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

$$= - \langle n | \hat{F} | n_0 \rangle \frac{\exp \left\{ \frac{i}{\hbar} (\epsilon_n - \epsilon_{n_0} - \hbar\omega) t \right\} - 1}{\epsilon_n - \epsilon_{n_0} - \hbar\omega} - \langle n | \hat{F}^+ | n_0 \rangle \frac{\exp \left\{ \frac{i}{\hbar} (\epsilon_n - \epsilon_{n_0} + \hbar\omega) t \right\} - 1}{\epsilon_n - \epsilon_{n_0} + \hbar\omega}$$

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

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

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

mit $\Omega^\pm := \Omega \pm \omega = \frac{\epsilon_n - \epsilon_{n_0} \pm \hbar\omega}{\hbar}$

Übergangswahrscheinlichkeit pro Zeit für $t \rightarrow \infty$
 von n_0 nach n :

$$W_{n n_0} = \frac{2\pi}{\hbar} |\langle n | \hat{F} | n_0 \rangle|^2 \delta(\epsilon_n - \epsilon_{n_0} - \hbar\omega) \quad \begin{array}{c} \epsilon_n \\ \uparrow \hbar\omega \\ \epsilon_{n_0} \end{array}$$

Absorption eines Quants $\hbar\omega$

$$+ \frac{2\pi}{\hbar} |\langle n_0 | \hat{F} | n \rangle|^2 \delta(\epsilon_n - \epsilon_{n_0} + \hbar\omega) \quad \begin{array}{c} \epsilon_{n_0} \\ \downarrow \hbar\omega \\ \epsilon_n \end{array}$$

Emission eines Quants $\hbar\omega$