Kvantummechanika A – gyakorlat
11. gyakorlat

Időfüggő perturbációszámítás

Időfüggő perturbációszámítás

Az időfüggő perturbációszámítást az motviálja, hogy olyan, egzaktul nehezen (vagy egyáltalán nem) kezelhető, rendszereket vizsgálhassunk, ahol valamilyen időfüggő és *külső* hatás következtében a különböző állapotok közt átmenetek történhetnek. Az időfüggő külső hatás a rendszer zártságának sérülését is eredményezheti. Az időfüggetlen esethez hasonlóan ekkor is szétválaszthatjuk a teljes Hamilton-operátort egy ismert és egy időfüggő perturbáló tagra:

$$\hat{H} = \hat{H}^{(0)} + \hat{\mathcal{V}}(t) \ .$$

Az előadáson elhangzottak alapján első rendben annak a valószínűsége, hogy egy $|i\rangle$ kezdeti és egy $|f\rangle$ végállapot között átmenet történik valamilyen $\Delta t = t_a - t_b$ idő alatt az alábbi alakban írható fel:

$$P_{i\to f}(t_a, t_b) = \frac{1}{\hbar^2}\left|\int\limits_{t_b}^{t_a} \mathrm{d}\tau \ \mathcal{V}_{fi}(\tau) e^{i\omega_{fi}\tau}\right|^2 ,$$

ahol

$$\mathcal{V}_{fi}(\tau) = \langle f|\hat{\mathcal{V}}(\tau)|i\rangle$$

és

$$\omega_{fi} = \frac{E_f - E_i}{\hbar} \ .$$

1. feladat

Először vizsgáljuk meg az alábbi egyszerű kétállapotú rendszert:

$$\hat{H}^{(0)} = E_0|0\rangle\langle 0| + E_1|1\rangle\langle 1| \ ,$$

ahol E_0, E_1 a sajátenergiák, míg $|0\rangle, |1\rangle$ a sajátállapotok. Kezdetben ($t = 0$) legyen a rendszer a $|0\rangle$ állapotban, majd kapcsoljuk be az alábbi gyenge időfüggő perturbációt

$$\hat{\mathcal{V}}(t) = \lambda\left[|1\rangle\langle 0|e^{-i\omega t} + |0\rangle\langle 1|e^{i\omega t}\right] .$$

Határozzuk meg, hogy milyen valószínűséggel történik átement a $|0\rangle$ állapotból az $|1\rangle$ állapotba. Írjuk fel a tanult formulát mint

$$P_{0\to 1}(t) = \frac{1}{\hbar^2}\left|\int\limits_0^t \mathrm{d}\tau \mathcal{V}_{10}(\tau) e^{i\omega_{10}\tau}\right|^2 ,$$

ahol $\omega_{10} = (E_1 - E_0)/\hbar$, míg a mátrixelem (a sajátállapotok ortonormáltsága miatt)

$$\mathcal{V}_{10}(t) = \langle 1|\hat{\mathcal{V}}(t)|0\rangle = \lambda e^{-i\omega t} .$$

Az átmenet valószínűsége így

$$\begin{aligned}
P_{0\to 1}(t) &= \frac{\lambda^2}{\hbar^2}\left|\int_0^t \mathrm{d}\tau \ \exp\left[i\left(\frac{E_1 - E_0}{\hbar} - \omega\right)t\right]\right|^2 \\
&= \frac{\lambda^2}{\hbar^2}\left|\frac{1}{i\big((E_1 - E_0)/\hbar - \omega\big)^2}\left\{\exp\left[i\left(\frac{E_1 - E_0}{\hbar} - \omega\right)t\right] - 1\right\}\right|^2 \\
&= \frac{4\lambda^2}{\hbar^2}\frac{1}{\big((E_1 - E_0)/\hbar - \omega\big)^2}\sin^2\left[\left(\frac{E_1 - E_0}{\hbar} - \omega\right)\frac{t}{2}\right] .
\end{aligned}$$

Látható, hogy a megoldás időben periodikus, illetve minél inkább közelíti a perturbáló ω az ω_{10} energiakülönbséget, annál nagyobb az átmenet valószínűsége.

2. feladat

A harmonikus oszcillátort perturbáljuk meg egy

$$\hat{\mathcal{V}}(t) = ae^{i\Omega t} + a^\dagger e^{-i\Omega t}$$

időfüggő operátorral. Tegyük fel, hogy a rendszer $t = 0$-ban az $|n\rangle$ állapotban van. A mátrixelem az $n \to m$ átmenetre a fentiek szerint:

$$\begin{aligned}
\langle m|\hat{\mathcal{V}}|n\rangle &= \sqrt{n}\langle m|n-1\rangle e^{i\Omega t} + \sqrt{n+1}\langle m|n+1\rangle e^{-i\Omega t} \\
&= \sqrt{n}e^{i\Omega t}\delta_{m,n-1} + \sqrt{n+1}e^{-i\Omega t}\delta_{m,n+1} .
\end{aligned}$$

A megjelenő Kronecker-deltákból láthatjuk, hogy átmenetek csak szomszédos állapotok között jöhetnek létre. A szomszédság miatt $\omega_{fi} = \pm\omega$ lehet. Először vegyük az $n \to n+1$ átmenetet; ekkor a valószínűség t_0 idő alatt:

$$\begin{aligned}
P_{n\to n+1}(t_0) &= \frac{1}{\hbar^2}\left|\sqrt{n+1}\int_0^{t_0} \mathrm{d}\tau \ e^{-i\Omega\tau}e^{i\omega\tau}\right|^2 = \frac{n+1}{\hbar^2}\left|\int_0^{t_0} \mathrm{d}\tau \ e^{i(\omega-\Omega)\tau}\right|^2 \\
&= \frac{2(n+1)}{\hbar^2(\omega-\Omega)^2}\big[1 - \cos\big((\omega-\Omega)t_0\big)\big] .
\end{aligned}$$

Az $n \to n-1$ átmenet ezzel analóg módon számítható:

$$P_{n\to n-1}(t_0) = \frac{n}{\hbar^2}\left|\int_0^{t_0} \mathrm{d}\tau \ e^{i(\Omega-\omega)\tau}\right|^2 = \frac{2n}{\hbar^2(\omega-\Omega)^2}\big[1 - \cos\big((\Omega-\omega)t_0\big)\big] .$$

Látható, hogy az egyetlen különbség a két eset között a prefaktorban szereplő n vagy $(n+1)$ szorzó.

3. feladat

Tekintsünk egy $t = -\infty$-ben alapállapotban lévő hidrogénatomot egy

$$|\mathbf{E}(t)| = \mathcal{E}(t) = \frac{B\tau}{e\pi}\frac{1}{\tau^2 + t^2}$$

függvénnyel leírható időfüggő, de állandó irányú elektromos térben. Azt szeretnénk meghatározni, hogy sok idő elteltével (értsd. a rendszer valamilyen karakterisztikus időtartamához képest) $t = \infty$-ben mekkora valószínűséggel lesz a $2p$ gerjesztett állapotban. Vegyük fel a koordinátrendszerünket úgy, hogy a z-tengely legyen párhuzamos $\mathbf{E}(t)$-vel. Ekkor az elektromos skalárpotenciál, azaz a perturbáló operátor

$$\hat{\mathcal{V}}(t) = -e\hat{\mathbf{r}}\mathbf{E}(t) = -er\mathcal{E}(t)\cos\vartheta \ .$$

Az alapállapot és a $2p$ gerjesztett állapot hullámfüggvénye

$$\begin{aligned}|1,0,0\rangle &= \frac{1}{\sqrt{\pi a^3}}e^{-r/a} \ , \\ |2,1,0\rangle &= \frac{1}{4\sqrt{2\pi a^3}}\frac{r}{a}e^{-r/(2a)}\cos\vartheta \ .\end{aligned}$$

A mátrixelem tehát

$$\begin{aligned}\langle 2,1,0|\hat{\mathcal{V}}(t)|1,0,0\rangle &= -\int \mathrm{d}^3\mathbf{r}\frac{1}{4\sqrt{2\pi a^3}}\frac{r}{a}e^{-r/(2a)}\cos\vartheta er\mathcal{E}(t)\cos\vartheta\frac{1}{\sqrt{\pi a^3}}e^{-r/a} \\ &= -e\mathcal{E}(t)\frac{1}{\sqrt{8}a^4}\int_0^\infty \mathrm{d}r\ r^4 e^{-3r/(2a)}\int_0^\pi \mathrm{d}\vartheta\ \sin\vartheta\cos^2\vartheta \ ,\end{aligned}$$

ahol áttértünk 3D gömbi koordinátákra és ki is integráltunk a polárkoordinátára, ami egy 2π szorzót ad. Legyen $z = \cos\vartheta$ és $y = r/a$, így az integrál kiszámítható mint (kételkedők ellenőrizhetik)

$$-e\mathcal{E}(t)\frac{a}{\sqrt{8}}\int_0^\infty \mathrm{d}y\ y^4 e^{-3y/2}\int_{-1}^1 \mathrm{d}z\ z^2 = -e\mathcal{E}(t)\frac{a}{3\sqrt{2}}\int_0^\infty \mathrm{d}y\ y^4 e^{-3y/2} = -e\mathcal{E}(t)\frac{2^7\sqrt{2}a}{3^5} \ .$$

Az átmenet valószínűsége

$$P = \frac{1}{\hbar^2}\left|\int_{-\infty}^\infty \mathrm{d}t\ e\mathcal{E}(t)\frac{2^7\sqrt{2}a}{3^5}e^{i\omega t}\right|^2 \ ,$$

ahol

$$\omega = -\frac{mc^2\alpha^2}{2}\left(\frac{1}{4} - 1\right) = \frac{3}{8}mc^2\alpha^2 \ .$$

Megjelenik az $\alpha = e^2/(4\pi\epsilon_0\hbar c) \approx 1/137$ finomszerkezeti állandó, ami egy dimenziótlan fizikai konstans. Hozzuk ki a konstans tagokat az integrálból és írjuk be expliciten az $\mathcal{E}(t)$ függvényt:

$$P = \frac{2^{15}a^2B^2\tau^2}{3^{10}\pi^2\hbar^2}\left|\int_{-\infty}^\infty \mathrm{d}t\ \frac{e^{i\omega t}}{\tau^2 + t^2}\right|^2 \ .$$

Az integrál könnyen kiszámítható a reziduumtétel segítségével. Az integrandus pólusai $t_0 = \pm i\tau$ helyen vannak. Zárjuk be az integrálási kontúrt a komplex sík „felső” félsíkjában egy félkörrel, majd tartsunk a végtelenbe a félkör sugarával: megmutatható, hogy a félkör menti járulék ilyenkor eltűnik, és csak a $+i\tau$ pólus ad járulékot az integrálba. A *Matematikai módszerek a fizikában* előadáson láttuk, hogy ha az integrandus felírható mint

$$f(z) = \frac{g(z)}{h(z)} ,$$

akkor a reziduum z_0 pólusnál

$$\mathrm{Res} f(z)\Big|_{z_0} = \frac{g(z_0)}{h'(z_0)} .$$

A mi esetünkben tehát

$$\mathrm{Res}\left[\frac{e^{i\omega t}}{\tau^2 + t^2}\right]\Bigg|_{i\tau} = \frac{e^{-\omega\tau}}{2i\tau} .$$

Az integrál így (az ekkor szokásos $2\pi i$ faktort sem elfelejtve)

$$\int\limits_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}t\, \frac{e^{i\omega t}}{\tau^2 + t^2} = 2\pi i \frac{e^{-\omega\tau}}{2i\tau} = \frac{\pi}{\tau} e^{-\omega\tau} .$$

Ennélfogva az átmenet valószínűsége:

$$P = \frac{1}{\hbar^2} \frac{2^{15} a^2 B^2}{3^{10}} e^{-2\omega\tau} .$$

4. feladat

Homogén mágneses térbe helyezett elektron spinjének viselkedését az alábbi Hamilton-operátorral tudjuk leírni:

$$\hat{H} = -\mu \begin{pmatrix} B_z & B_x - iB_y \\ B_x + iB_y & -B_z \end{pmatrix} ,$$

ahol μ az ún Bohr-magneton. Kezdetben a mágneses tér legyen

$$\mathbf{B}_0 = \begin{pmatrix} B_0 \cos\varphi \\ B_0 \sin\varphi \\ 0 \end{pmatrix} = \text{állandó} .$$

Tegyük fel, hogy egy pillanatra bekapcsolunk egy tisztán x-irányú $\mathbf{B}_1(t)$ perturbációt mint

$$\mathbf{B}_1(t) = \begin{pmatrix} \beta\delta(t) \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} .$$

Legyen $B_0, \beta > 0$! Először – szokásos módon – vizsgáljuk a perturbálatlan esetet: ekkor a Hamilton-operátor

$$\hat{H}^{(0)} = -\mu B_0 \begin{pmatrix} 0 & \cos\varphi - i\sin\varphi \\ \cos\varphi + i\sin\varphi & 0 \end{pmatrix} = -\mu B_0 \begin{pmatrix} 0 & e^{-i\varphi} \\ e^{i\varphi} & 0 \end{pmatrix} .$$

A kapott mátrix sajátértékei a $\lambda^2 - 1 = 0$ egyenletből $\lambda_\pm = \mp 1$-nek adódnak, azaz a lehetséges energiák

$$E_\pm = \pm\mu B_0$$

lesznek. A sajátállapotok pedig (szorgalmi feladat megmutatni):

$$|+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} -1 \\ e^{i\varphi} \end{pmatrix} \qquad \text{és} \qquad |-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ e^{i\varphi} \end{pmatrix} .$$

Vizsgáljuk meg, hogy milyen valószínűségekkel jöhet létre átmenet a $|-\rangle$ állapotból a $|+\rangle$ állapotba a fent említett pillanatnyi perturbáció hatására! A perturbáló operátor felírható mint

$$\hat{\mathcal{V}}(t) = -\mu\beta\delta(t) \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} .$$

A keresett valószínűség pedig

$$P_{-\to+} = \frac{1}{\hbar^2} \left| \int\limits_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}\tau \mathcal{V}_{+-}(\tau) e^{i\omega_{+-}\tau} \right|^2 ,$$

ahol $\omega_{+-} = (E_+ - E_-)/\hbar = 2\mu B_0/\hbar$. A mátrixelem

$$\begin{aligned} \mathcal{V}_{+-}(t) &= -\mu\beta\delta(t) \left\langle + \left| \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \right| - \right\rangle = -\frac{\mu\beta\delta(t)}{2} \begin{pmatrix} -1 & e^{-i\varphi} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ e^{i\varphi} \end{pmatrix} \\ &= -\frac{\mu\beta\delta(t)}{2} (e^{-i\varphi} - e^{i\varphi}) = i\mu\beta\delta(t)\sin\varphi . \end{aligned}$$

Ennélfogva az átmenet valószínűsége:

$$P_{-\to+} = \frac{\mu^2\beta^2\sin^2\varphi}{\hbar^2} \underbrace{\left| \int\limits_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}\tau \delta(\tau) e^{i\omega_{+-}\tau} \right|^2}_{1} = \frac{\mu^2\beta^2\sin^2\varphi}{\hbar^2} .$$

Látható, hogy a valószínűség minimális, ha $\varphi = 0$ vagy π, azaz a $\mathbf{B}_0$ tér párhuzamos az x-tengellyel, míg maximális, ha $\varphi = \pi/2$ vagy $3\pi/2$, azaz $\mathbf{B}_0$ párhuzamos az y-tengellyel.

5. feladat

Tekintsük az alábbi háromállapotú rendszert:

$$\hat{H} = \begin{pmatrix} E_1 & K(t) & -K(t) \\ K(t) & E_2 & 0 \\ -K(t) & 0 & E_3 \end{pmatrix} ,$$

ahol $K(t) = \epsilon V_0 e^{-|t|/\tau}$, és $\epsilon \ll 1$, illetve $V_0, \tau > 0$. A $t = -\infty$-ben legyünk az E_3 sajátenergiájú állapotban, és arra vagyunk kíváncsiak, hogy milyen valószínűséggel leszünk $t = \infty$-ben az E_1 vagy E_2 energiájú állapotokban. Ismerjük fel, hogy a perturbálatlan Hamilton-operátor diagonális mátrix lesz, továbbá sajátértékei E_1, E_2 és E_3, míg sajátvektorai $|1\rangle = (1,0,0), |2\rangle = (0,1,0)$ és $|3\rangle = (0,0,1)$. A szükséges mátrixelemek számíthatók mint

$$\mathcal{V}_{13}(t) = \langle 1|\hat{\mathcal{V}}(t)|3\rangle = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & K(t) & -K(t) \\ K(t) & 0 & 0 \\ -K(t) & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} = -K(t)$$

és

$$\mathcal{V}_{23}(t) = \langle 2|\hat{\mathcal{V}}(t)|3\rangle = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & K(t) & -K(t) \\ K(t) & 0 & 0 \\ -K(t) & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} = 0 \, ,$$

azaz (vezető rendben) csak az $1 \to 3$ átmenet lehetséges. Ennek az átementnek a valószínűsége:

$$\begin{aligned} P_{3\to 1} &= \frac{1}{\hbar^2} \left| \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}\tau' \; K(\tau') \exp\left[i \left(\frac{E_1 - E_3}{\hbar} \right) \tau' \right] \right|^2 \\ &= \frac{\epsilon^2 V_0^2}{\hbar^2} \left| \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}\tau' \; \exp\left[-\frac{|\tau'|}{\tau} + i \left(\frac{E_1 - E_3}{\hbar} \right) \tau' \right] \right|^2 . \end{aligned}$$

Az abszolútértéket megkerülve felírhatjuk az integrált mint két integrál összege:

$$\begin{aligned} &\int_{-\infty}^{0} \mathrm{d}\tau' \; \exp\left[-\frac{\tau'}{\tau} + i \left(\frac{E_1 - E_3}{\hbar} \right) \tau' \right] + \int_{0}^{\infty} \mathrm{d}\tau' \; \exp\left[\frac{\tau'}{\tau} + i \left(\frac{E_1 - E_3}{\hbar} \right) \tau' \right] \\ &= \frac{1}{1/\tau + i(E_1 - E_3)/\hbar} - \frac{1}{-1/\tau + i(E_1 - E_3)/\hbar} = \frac{1/\tau}{1/\tau^2 + \big((E_1 - E_3)/\hbar\big)^2} \, . \end{aligned}$$

Az abszolútérték négyzetre emelés után egy kevés algebrával az átmenet valószínűsége:

$$P_{3\to 1} = \frac{4\epsilon^2 V_0^2}{\hbar^2} \frac{\tau^2}{\big(\tau^2 (E_3 - E_1)^2/\hbar^2 + 1\big)^2} \, .$$