Time-independent Hamiltonian with a time-dependent perturbation

Рассмотрим вариант теории возмущений, полагая, что невозмущенный гамильтониан не зависит от времени, а возмущение зависит. Таким образом, возмущенный гамильтониан может быть разложен по степеням возмущения:

$$\hat{H}(t) = \hat{H}^{(0)} + \lambda\hat{V} = \hat{H}^{(0)} + \lambda\hat{H}^{(1)}(t) + \lambda^2\hat{H}^{(2)}(t) + \dots$$

Используя формализм временной теории возмущений, аппроксимируем решение $\Psi(\mathbf{r}, t)$ временного уравнения Шредингера:

$$i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} = \hat{H}(t)\Psi$$

В произвольный момент t функция $\Psi(\mathbf{r}, t)$ может быть разложена в полном базисе собственных функций $\psi_k^{(0)}(\mathbf{r})$ невозмущенного гамильтониана $\hat{H}^{(0)}$:

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \sum_k b_k(t)\psi_k^{(0)}(\mathbf{r})$$

Переобозначим коэффициенты разложения для упрощения дальнейших выкладок $b_k(t) = a_k(t)\exp\left(-\frac{i}{\hbar}E_k^{(0)}t\right)$:

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \sum_k a_k(t)\psi_k^{(0)}(\mathbf{r})\exp\left(-\frac{i}{\hbar}E_k^{(0)}t\right)$$

Подставляя данное разложение во временное уравнение Шредингера, получаем (используем бракет нотацию $\psi_m = |m^{(0)}\rangle$) :

$$i\hbar\sum_m \frac{da_m(t)}{dt}|m^{(0)}\rangle\exp\left(-\frac{i}{\hbar}E_m^{(0)}t\right) = \sum_m a_m(t)\lambda\hat{V}(t)|m^{(0)}\rangle\exp\left(-\frac{i}{\hbar}E_m^{(0)}t\right)$$

Умножаем слева обе части на бра-вектор $\langle k^{(0)}|$ и используем ортогонормированность собственных функций невозмущенного гамильтониана:

$$i\hbar\frac{da_k(t)}{dt}\exp\left(-\frac{i}{\hbar}E_k^{(0)}t\right) = \sum_m a_m(t)\lambda\langle k^{(0)}|\hat{V}(t)|n^{(0)}\rangle\exp\left(-\frac{i}{\hbar}E_m^{(0)}t\right)$$

При дальнейших преобразованиях будем использовать вариант теории возмущения первого порядка, возмущение будем считать линейным по параметру разложения λ: $\hat{H}(t) = \hat{H}^{(0)} + \lambda\hat{H}^{(1)}(t)$. Разрешаем уравнения относительно производных коэффициентов $a_k(t)$:

$$\frac{da_k(t)}{dt} = -\frac{i\lambda}{\hbar}\sum_m a_m(t)H_{km}^{(1)}(t)\exp\left(i\omega_{km}t\right),$$

где были введены обозначения резонансной частоты $\omega_{kn} = \frac{1}{\hbar}\left(E_k^{(0)} - E_n^{(0)}\right)$ и матричного элемента $H_{kn}^{(1)}(t) = \langle k^{(0)}|\hat{H}^{(1)}|n^{(0)}\rangle$.

Интегрируя дифференциальные уравнения, получаем

$$a_k(t) - a_k(0) = -\frac{i\lambda}{\hbar}\sum_m \int\limits_0^t a_m(t') H^{(1)}_{kn}(t') \exp\left(i\omega_{kn}t'\right) dt' \tag{1}$$

Разложим коэффициенты $a_k(t)$ в ряд по степеням параметра возмущения λ:

$$a_k(t) = a_k^{(0)}(t) + \lambda a_k^{(1)}(t) + \lambda^2 a_k^{(2)}(t) + \ldots \tag{2}$$

Имеем ввиду, что параметр возмущения λ никак не связан со временем t. Считаем, что в момент времени t система не возмущена и мы все о ней знаем, для коэффициентов $a_k(t)$ это имеет следующее значение:

$$a_k(0) = a_k^{(0)}(0)$$

Дополнительно положим

$$a_m^{(0)}(0) = \delta_{mj}, \tag{3}$$

имея ввиду, что в момент времени $t = 0$ система находится исключительно в состоянии $|j^{(0)}\rangle$. Подставляя разложение (2) в уравнения (1), получим

$$a_k^{(0)}(t) - a_k^{(0)}(0) = 0$$

$$a_k^{(1)}(t) - a_k^{(1)}(0) = -\frac{i}{\hbar}\sum_m \int\limits_0^t a_m^{(0)}(t') H^{(1)}_{km}(t') \exp(i\omega_{km}t') dt'$$

$$a_k^{(2)}(t) - a_k^{(2)}(0) = -\frac{i}{\hbar}\sum_m \int\limits_0^t a_m^{(1)}(t') H^{(1)}_{km}(t') \exp(i\omega_{km}t') dt'$$

$$\ldots$$

Полученные уравнения являются рекурсивными и позволяют найти значения коэффициентов более высокого порядка разложения $a_k^{(m+1)}(t)$ при наличии коэффициентов предыдущего уровня $a_k^{(m)}(t)$. Используя дополнительное предположение (3) о невозмущенном состоянии, преобразуем выражение для коэффициентов разложения первого порядка $a_k^{(1)}(t)$:

$$a_k^{(1)}(t) = -\frac{i}{\hbar}\sum_m \int\limits_0^t a_m^{(0)}(t') H^{(1)}_{km}(t') \exp\left(i\omega_{km}t'\right) dt' = -\frac{i}{\hbar}\int\limits_0^t H^{(1)}_{kj}(t') \exp\left(i\omega_{kj}t'\right) dt' \tag{4}$$

Вероятность найти систему в состоянии $|k^{(0)}\rangle$ в момент времени t определяется квадратом модуля коэффициента $a_k(t)$:

$$P_k(t) = |a_k(t)|^2 = |a_k^{(0)}(t) + \lambda a_k^{(1)} + \lambda^2 a_k^{(2)}(t) + \ldots|^2$$

Полагая $H^{(1)}_{kj}$ в (4) не зависящим от t:

$$a_k^{(1)}(t) = -\frac{H^{(1)}_{kj}}{\hbar}\frac{\exp\left(i\omega_{kj}t\right) - 1}{\omega_{kj}}, \quad k \neq j$$

Определим для этого случая вероятность нахождения частицы в состоянии $|k\rangle$ в момент времени t:

$$P_k = |a_k^{(1)}|^2 = |H_{kj}^{(1)}|^2 \frac{1}{\omega_{kj}^2 \hbar^2} |\exp{(i\omega_{kj}t)} - 1|^2$$

$$\begin{array}{r} Re\left\{\exp{(i\omega_{kj}t)}\right\} = \cos{(\omega_{kj}t)} - 1 \\ Im\left\{\exp{(i\omega_{kj}t)}\right\} = \sin{(\omega_{kj}t)} \end{array} \quad \Longrightarrow \quad |\exp{(i\omega_{kj}t)} - 1|^2 = 2 - 2\cos{(\omega_{kj}t)} = 4\sin^2\left(\frac{1}{2}\omega_{kj}t\right)$$

$$P_k = 4|H_{kj}^{(1)}|^2 \frac{\sin^2\left(\frac{1}{2}\omega_{kj}t\right)}{\left(\omega_{kj}\hbar\right)^2}$$