

## Aufgabe 37: Störungsrechnung

Der Hamilton-Operator eines 3-Zustands-Systems ist durch  $H = H_0 + V$  gegeben, wobei

$$H_0 = \hbar\omega \begin{pmatrix} 2 & 0 & 0 \\ 0 & 5 & 0 \\ 0 & 0 & 6 \end{pmatrix}, \quad V = \begin{pmatrix} 0 & \alpha & \beta \\ \alpha & 0 & 0 \\ \beta & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

Darin ist  $V$  als Störung aufzufassen, d.h.,  $\alpha, \beta \ll \hbar\omega$ . Hier sind beide Operatoren in der Basis der ungestörten Energieeigenzustände  $|1\rangle^{(0)}, |2\rangle^{(0)}, |3\rangle^{(0)}$  zu den Eigenwerten  $E_1 = 2\hbar\omega, E_2 = 5\hbar\omega, E_3 = 6\hbar\omega$  geschrieben.

- Berechnen Sie den Grundzustand in 1. Ordnung und die Grundzustandsenergie in 2. Ordnung zeitunabhängiger Störungsrechnung.
- Die Störung  $V$  sei jetzt nur für  $0 < t < t_1$  eingeschaltet. Das System befinde sich zum Zeitpunkt  $t = 0$  im Zustand  $|2\rangle^{(0)}$ . Berechnen Sie den Wahrscheinlichkeit, das System zu einem Zeitpunkt  $t_{obs} > t_1$  im Zustand  $|1\rangle^{(0)}$  vorzufinden in erster Ordnung zeitabhängiger Störungstheorie.
- Sei nun wieder  $V(t) = const = V$ . Das ungestörte System habe jedoch einen entarteten Grundzustand: wir setzen  $\langle 2|H_0|2\rangle = 2\hbar\omega$ . Wie lauten unter Berücksichtigung von  $V$  bis zur ersten Ordnung der entarteten Störungsrechnung die Energien und Energieeigenzustände?

### LSG a)

Für den Eigenzustand in der Störungsrechnung gilt:

$$|n\rangle = |n\rangle^{(0)} + \sum_{k \neq n} \frac{\langle k|V|n\rangle}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}} |k\rangle^{(0)} + \dots$$

Für den Grundzustand bis erster Ordnung:

$$|1\rangle = |1\rangle^{(0)} + \frac{\langle 2|V|1\rangle}{E_1^{(0)} - E_2^{(0)}} |2\rangle^{(0)} + \frac{\langle 3|V|1\rangle}{E_1^{(0)} - E_3^{(0)}} |3\rangle^{(0)} \quad (1)$$

$$= |1\rangle^{(0)} + \frac{\alpha}{\hbar\omega 2 - \hbar\omega 5} |2\rangle^{(0)} + \frac{\beta}{\hbar\omega 2 - \hbar\omega 6} |3\rangle^{(0)} \quad (2)$$

$$= |1\rangle^{(0)} - \frac{\alpha}{\hbar\omega 3} |2\rangle^{(0)} - \frac{\beta}{\hbar\omega 4} |3\rangle^{(0)} \quad (3)$$

$$(4)$$

Für die Energie bis zu der zweiter Ordnung gilt:

$$E_n = E_n^{(0)} + E_n^{(1)} + E_n^{(2)} \quad (5)$$

$$= E_n^{(0)} + \langle n|V|n\rangle + \sum_{k \neq n} \frac{|\langle k|V|n\rangle|^2}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}} \quad (6)$$

Da die Grundzustandsenergie per Definition der kleinste Energiezustand ist, d.h. in dem Beispiel  $E_1 = \hbar\omega \cdot 2$ :

$$E_1 = \hbar\omega 2 + 0 + \frac{|\langle 2|V|1\rangle|^2}{\hbar\omega 2 - \hbar\omega 5} + \frac{|\langle 3|V|1\rangle|^2}{\hbar\omega 2 - \hbar\omega 6}$$

### LSG b)

Für die Berechnung der Wahrscheinlichkeiten ist es leichter/zweckmäßig das System im Wechselwirkungsbild zu betrachten, da dort die statische Komponente  $H_0$  keine Rolle spielt:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\alpha, t_0; t\rangle_I = V_I |\alpha, t_0; t\rangle_I$$

Dies lässt sich weiter umformen zu:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} U_I(t, t_0) = V_I U(t, t_0)$$

mit  $U_I$  als einen unitären Zeitentwicklungsoperator  $|\alpha, t_0; t\rangle_I = U_I(t, t_0)|\alpha, t_0; t\rangle_S$  der den  $t_0$ -Zustand zu einen beliebigen  $t$  Zeitzustand 'transformiert'. Integration der obigen Gleichung über die Zeit ergibt eine rekursive Formel:

$$U_I^{(n)}(t, t_0) = 1 - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t V_I U_I^{(n-1)}(t, t_0) dt$$

Der unitäre Zeitentwicklungsoperator  $U_I$  soll den Zustand nicht verändern wenn keine Zeitdifferenz vorhanden ist, sprich  $U_I(t_0, t_0) = 1$ . Zeitabhängige Störung 0.Ordnung ist demnach:

$$U_I^{(0)}(t, t_0) = 1$$

und 1. Ordnung ergibt sich aus dem Einsetzen in die Rekursive Formel:

$$U_I^{(1)}(t, t_0) = 1 - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t V_I U_I^{(0)}(t, t_0) dt = 1 - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t V_I dt$$

Nun werden die Zeitabhängigen Matrixelemente von  $U_I$  benötigt. Ein Zustand im WW-Bild lässt sich offenbar in Abhängigkeit der Zeitabhängigen Matrixelemente  $c_n(t)$  entwickeln:

$$|i, t_0, t\rangle_I = U_I(t, t_0)|i\rangle \quad (7)$$

$$= \mathbb{1} \cdot U_I(t, t_0)|i\rangle \quad (8)$$

$$= \sum_n |n\rangle \langle n| U_I(t, t_0) |i\rangle \quad (9)$$

$$= \sum_n c_n(t) |n\rangle \quad (10)$$

Diese Koeffizienten  $c_n(t) \equiv \langle n| U_I(t, t_0) |i\rangle$  bestimmen den (Übergangs)-Zustand des Systems und deren Betragsquadrat  $|c_n(t)|^2$  die Übergangs-Wahrscheinlichkeit. In 1.Ordnung Störungsrechnung werden zunächst die Matrixelemente von  $U_I^{(1)}(t, t_0)$  berechnet:

$$c_n^{(1)}(t) = \langle n| U_I^{(1)}(t, t_0) |i\rangle = \langle n| i\rangle - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t \langle n| V_I |i\rangle dt$$

Der Störungsoperator  $V_I$  ist von der Zeit abhängig, um das Integral zu berechnen wird hier nun das Schrödinger Bild gewählt:

$$c_n^{(1)}(t) = \delta_{ni} - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^{t'} \langle n| e^{\frac{i}{\hbar} E_n t'} V_S e^{-\frac{i}{\hbar} E_i t'} |i\rangle dt' \quad (11)$$

$$= \delta_{ni} - \frac{i}{\hbar} \langle n| V_S |i\rangle \int_{t_0}^{t'} dt' e^{\frac{i}{\hbar} (E_n - E_i) t'} \quad (12)$$

$$= \delta_{ni} - \frac{i}{\hbar} \langle n| V_S |i\rangle \int_{t_0}^{t'} dt e^{i\omega_{ni} t'} \quad (13)$$

Mit  $\omega_{ni} = \frac{E_n - E_i}{\hbar}$ .

In unserem Fall befindet sich das System im Zustand  $|2\rangle^{(0)} \equiv |i\rangle$ . Es soll die Wahrscheinlichkeit im Zustand  $|1\rangle^{(0)} \equiv |n\rangle$  bestimmt werden. Konkret heißt das:

$$c_1^{(1)}(t) = \langle 1| U_I^{(1)}(t, t_0) |2\rangle = 0 - \frac{i}{\hbar} \langle 1| V_S |2\rangle \int_{t_0}^{t'} dt' e^{i\omega_{12} t'} = -\frac{i}{\hbar} \alpha \int_{t_0}^{t'} dt' e^{i\omega(2-5)t'}$$

$$c_1^{(1)}(t) = -\frac{i}{\hbar} \alpha \left[ \frac{e^{-i3\omega t'}}{-i3\omega} \right]_0^t = -\frac{i}{\hbar} \alpha \left( \frac{e^{-i3\omega t}}{-i3\omega} - \frac{1}{-i3\omega} \right) = \frac{\alpha}{3\hbar\omega} (e^{-i3\omega t} - 1)$$

Die Übergangswahrscheinlichkeit ist das Betragsquadrat des Matrixelements:

$$p_{2 \rightarrow 1} = |c_1^{(1)}(t)|^2 = \frac{\alpha^2}{9\hbar^2\omega^2}(e^{i3\omega t} - 1)(e^{-i3\omega t} - 1) \quad (14)$$

$$= \frac{\alpha^2}{9\hbar^2\omega^2}(1 - e^{i3\omega t} - e^{-i3\omega t} + 1) \quad (15)$$

$$= \frac{\alpha^2}{9\hbar^2\omega^2}(2 - (e^{i3\omega t} + e^{-i3\omega t})) \quad (16)$$

$$= \frac{2\alpha^2}{9\hbar^2\omega^2}(1 - \cos(3\omega t)) \quad (17)$$

## LSG c)

Der  $H_0$  Operator hat nun 2 Zustände zu einem Energiewert  $\hbar\omega \cdot 2 \Rightarrow$  entartet.

$$H_0 = \hbar\omega \begin{pmatrix} 2 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 6 \end{pmatrix}, \quad V = \begin{pmatrix} 0 & a & b \\ a & 0 & 0 \\ b & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

und  $V(t) = \text{const} = V$ ,  $\alpha$  in a und  $\beta$  in b über ( $\alpha, \beta$  eignen sich etwas besser als Indizes für die Herleitung im Entarteten Unterraum).

Die Energie  $E_n = E_2 = 2\hbar\omega$  ist zweifach entartet, dazu gehören die zwei Zustände im nicht entarteten Fall  $|1\rangle^{(0)} |2\rangle^{(0)}$ . Als Eigenwert Gleichung so Ausgedrückt:

$$H_0|1\rangle^{(0)} = E_2|1\rangle^{(0)}$$

$$H_0|2\rangle^{(0)} = E_2|2\rangle^{(0)}$$

Oder wenn man den Entarteten Unterraum separat betrachtet gilt für  $\alpha = 1, 2$  allgemein:

$$H_0|\alpha\rangle^{(0)} = E_\alpha|\alpha\rangle^{(0)}$$

Nach dem Überlagerungsprinzip, wonach die Summe der Zustandsfunktionen ebenso eine Lösung für die Eigenwertgleichung erfüllt:

$$|n_\alpha\rangle^{(0)} = \sum_\alpha c_\alpha |\alpha\rangle^{(0)}$$

$$H_0|n_\alpha\rangle^{(0)} = E_\alpha|n_\alpha\rangle^{(0)} = E_\alpha \mathbb{1}|n_\alpha\rangle^{(0)} = E_\alpha \sum_\alpha |\alpha\rangle^{(0)} \cdot \langle\alpha|n_\alpha\rangle^{(0)} = E_\alpha \sum_\alpha c_\alpha |\alpha\rangle^{(0)}$$

Wobei die Koeffizienten  $c_\alpha = \langle\alpha|n_\alpha\rangle^{(0)}$

Nun benötigen wir aus der Störungsrechnung die Gleichung mit der ersten Potenz  $\lambda^1$

$$(H_0 - E_\alpha^{(0)})|n_\alpha\rangle^{(1)} = (E_\alpha^{(1)} - V)|n_\alpha\rangle^{(0)}$$

Multipliziert diese Gleichung mit  $\langle\alpha|$  und wählt ein anderen Index  $|n_\alpha\rangle \rightarrow |n_\beta\rangle$

$$\langle\alpha|(H_0 - E_\alpha^{(0)})|n_\beta\rangle^{(1)} = \langle\alpha|(E_\alpha^{(1)} - V)|n_\beta\rangle^{(0)} \quad (18)$$

$$\langle\alpha|\underbrace{(E_\alpha^{(0)} - E_\alpha^{(0)})}_{=0}|n_\beta\rangle^{(1)} = \langle\alpha|(E_\alpha^{(1)} - V)|n_\beta\rangle^{(0)} \quad (19)$$

mit  $|n_\beta\rangle^{(0)} = \sum_\beta c_\beta |\beta\rangle^{(0)}$  und  $\langle\alpha|n_\beta\rangle = c_\beta \delta_{\alpha\beta}$  folgt

$$\Rightarrow \langle\alpha|V - E_\beta^{(1)}|n_\beta\rangle^{(0)} = 0$$

$$\langle\alpha|V|n_\beta\rangle^{(0)} - E_\beta^{(1)}\langle\alpha|n_\beta\rangle^{(0)} = 0$$

$${}^{(0)}\langle\alpha|V|n_\beta\rangle^{(0)} - E_\beta^{(1)}c_\alpha\delta_{\alpha\beta} = 0$$

Ersetze nun  $|n_\beta\rangle^{(0)}$  mit der Summe der Entarteten untervektoren als  $|n_\beta\rangle^{(0)} = \sum_\beta |\beta\rangle$ . Der Index  $\beta$  läuft genau wie  $\alpha$  über alle entarteten Zustände

$$\sum_\beta V_{\alpha\beta} - E_\beta^{(1)}c_\alpha\delta_{\alpha\beta} = 0$$

Das ist offensichtlich eine Sekulärgleichung im entarteten Unterraum mit einem Ausschnitt aus der Störungsmatrix (in unserem Fall):

$$V_{\alpha\beta} = \begin{pmatrix} 0 & a \\ a & 0 \end{pmatrix}$$

Oder als Eigenwertgleichung:

$$V|\alpha\rangle^{(0)} = E_\alpha^{(1)}c_\alpha|\alpha\rangle^{(0)}$$

$$V|\alpha\rangle^{(0)} = E_\alpha^{(1)}|\alpha\rangle^{(0)}$$

Lösen der Determinante:

$$\begin{vmatrix} 0 - \lambda & a \\ a & 0 - \lambda \end{vmatrix} = \lambda^2 - a^2 = 0$$

$$\Rightarrow \lambda = \pm a$$

ist das Ergebniss:  $E_\alpha^{(1)} = \pm a$ . Das bedeutet, dass die Lösung dieser Eigenwertgleichung im entarteten Unterraum der Störungsmatrix, uns die Energie-Eigenwerte in 1 Ordnung der Störung liefert. Die gesamte Energie (bis zur 1 Ordnung) sieht dann so aus:

$$E_n^{(ges)} = E_n^{(0)} + E_n^{(1)}$$

Im entarteten Unterraum dann so:

$$E_\alpha^{(ges)} = E_\alpha^{(0)} + E_\alpha^{(1)} = E_\alpha^{(0)} \pm a$$

Die Gesamtenergie ist dank der konstanten Störung nicht mehr entartet. Die Störung hebt offensichtlich (i.a. teilweise oder ganz) die Entartung auf.

Für die Eigenvektoren im entarteten Unterraum ergibt sich:

$$|+a\rangle :$$

$$\begin{pmatrix} 0 & a \\ a & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = a \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} \rightarrow x = y$$

$$\Rightarrow |+a\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}}(|1\rangle^{(0)} + |2\rangle^{(0)})$$

$$|-a\rangle :$$

$$\begin{pmatrix} 0 & a \\ a & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = -a \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} \rightarrow x = -y$$

$$\Rightarrow |-a\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}}(|1\rangle^{(0)} - |2\rangle^{(0)})$$