Aufgabe 37: Störungsrechnung

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

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

Darin ist V als Störung aufzufassen, d.h, $\alpha, \beta << \hbar\omega$. 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.

(a) Berechnen Sie den Grundzustand in 1. Ordnung und die Grundzustandsenergie in 2. Ordnung zeitunabhängiger Störungsrechnung.

(b) 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.

(c) 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:

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

Für den Grundzustand bis erster Ordnung:

$$\begin{aligned} |1\rangle &= |1\rangle^{(0)} + \frac{\langle 2|V|1\rangle}{E_1^{(0)} - E_2^{(0)}} |2\rangle^{(0)} + \frac{\langle 3|V|1\rangle}{E_1^{(0)} - E_3^{(0)}} |3\rangle^{(0)} && (1) \\ &= |1\rangle^{(0)} + \frac{\alpha}{\hbar\omega 2 - \hbar\omega 5} |2\rangle^{(0)} + \frac{\beta}{\hbar\omega 2 - \hbar\omega 6} |3\rangle^{(0)} && (2) \\ &= |1\rangle^{(0)} - \frac{\alpha}{\hbar\omega 3} |2\rangle^{(0)} - \frac{\beta}{\hbar\omega 4} |3\rangle^{(0)} && (3) \\ & && (4) \end{aligned}$$

Für die Energie bis zu der zweiter Ordnung gilt:

$$\begin{aligned} E_n &= E_n^{(0)} + E_n^{(1)} + E_n^{(2)} && (5) \\ &= E_n^{(0)} + \langle n|V|n\rangle + \sum_{k \neq n} \frac{|\langle k|V|n\rangle|^2}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}} && (6) \end{aligned}$$

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 Sytem im Wechselwirkungsbild zu betrachten, da dort die Statische Komponente H_0 keine rolle spielt:

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

Dies lässt sich weiter umformen zu:

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

mit U_I als einen unitären Zeitentwicklungsoperator $|\alpha, t_0; t\rangle_I = U_I(t,t_0)|\alpha, t_0; t\rangle_I$ 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 verändert 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:

$$\begin{aligned}
|i, t_0, t\rangle_I &= U_I(t,t_0)|i\rangle && (7)\\
&= \mathbb{1}\cdot U_I(t,t_0)|i\rangle && (8)\\
&= \sum_n |n\rangle\langle n|U_I(t,t_0)|i\rangle && (9)\\
&= \sum_n c_n(t)|n\rangle && (10)
\end{aligned}$$

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-Warhscheinlichkeit. 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:

$$\begin{aligned}
c_n^{(1)}(t) &= \delta_{ni} - \frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t'}\langle n|e^{\frac{i}{\hbar}E_n t'} V_S e^{-\frac{i}{\hbar}E_i t'}|i\rangle dt' && (11)\\
&= \delta_{ni} - \frac{i}{\hbar}\langle n|V_S|i\rangle\int_{t_0}^{t'} dt' e^{\frac{i}{\hbar}(E_n - E_i)t'} && (12)\\
&= \delta_{ni} - \frac{i}{\hbar}\langle n|V_S|i\rangle\int_{t_0}^{t'} dt e^{i\omega_{ni}t'} && (13)
\end{aligned}$$

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 Warscheinlichkeit im Zustand $|1\rangle^{(0)} \equiv |n\rangle$ bestimmt werden. Konkret heißt das:

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

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

Die Übergangswahrscheinlichkeit ist das Betragsquadrat des Matrixelements:

$$\begin{aligned}
p_{2\to 1} = |c_1^{(1)}(t)|^2 &= \frac{\alpha^2}{9\hbar^2\omega^2}(e^{i3\omega t}-1)(e^{-i3\omega t}-1) && (14)\\
&= \frac{\alpha^2}{9\hbar^2\omega^2}(1-e^{i3\omega t}-e^{-i3\omega t}+1) && (15)\\
&= \frac{\alpha^2}{9\hbar^2\omega^2}(2-(e^{i3\omega t}+e^{-i3\omega t})) && (16)\\
&= \frac{2\alpha^2}{9\hbar^2\omega^2}(1-cos(3\omega t)) && (17)
\end{aligned}$$

LSG c)

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

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

und $V(t) = const = V$, α in a und β in b über (α, β eignen sich etwas besser als Indizies 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:

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

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

Wobei die Koeffizienten $c_\alpha =^{(0)} \langle\alpha|n_\alpha\rangle^{(0)}$
Nun benötigen wir aus der Störungsrechnung die Gleichung mit der ersten Potenz λ^1

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

Multipliziert diese Gleichung mit ${}^{(0)}\langle\alpha|$ und wählt ein anderen Index $|n_\alpha\rangle \to |n_\beta\rangle$

$$\begin{aligned}
{}^{(0)}\langle\alpha|(H_0 - E_\alpha^{(0)})|n_\beta\rangle^{(1)} &=^{(0)} \langle\alpha|(E_\alpha^{(1)} - V)|n_\beta\rangle^{(0)} && (18)\\
{}^{(0)}\langle\alpha|\underbrace{(E_\alpha^{(0)} - E_\alpha^{(0)})}_{=0}|n_\beta\rangle^{(1)} &=^{(0)} \langle\alpha|(E_\alpha^{(1)} - V)|n_\beta\rangle^{(0)} && (19)
\end{aligned}$$

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

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

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

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

Ersetze nun $|n_\beta\rangle^{(0)}$ mit der Summe der Entarteten untervektoren als $|n_\beta\rangle^{(0)} = \sum_\beta |\beta\rangle$. Der Index β läuft genau wie α 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:

$$|+a\rangle :$$

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

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

$$|-a\rangle :$$

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

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