

## 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:

$$|1\rangle = |1\rangle^{(0)} + \frac{\langle 2|V|1\rangle}{E_1^{(0)} - E_2^{(0)}} |2\rangle^{(0)} + \frac{\langle 3|V|1\rangle}{E_1^{(0)} - E_3^{(0)}} |3\rangle^{(0)} \quad (0.1)$$

$$= |1\rangle^{(0)} + \frac{\alpha}{\hbar\omega 2 - \hbar\omega 5} |2\rangle^{(0)} + \frac{\beta}{\hbar\omega 2 - \hbar\omega 6} |3\rangle^{(0)} \quad (0.2)$$

$$= |1\rangle^{(0)} - \frac{\alpha}{\hbar\omega 3} |2\rangle^{(0)} - \frac{\beta}{\hbar\omega 4} |3\rangle^{(0)} \quad (0.3)$$

$$(0.4)$$

Für die Energie bis zu der zweiter Ordnung gilt:

$$E_n = E_n^{(0)} + E_n^{(1)} + E_n^{(2)} \quad (0.5)$$

$$= E_n^{(0)} + \langle n|V|n\rangle + \sum_{k \neq n} \frac{|\langle k|V|n\rangle|^2}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}} \quad (0.6)$$

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 Sytem 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:

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

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:

$$|i, t_0, t\rangle_I = U_I(t, t_0)|i\rangle \quad (0.7)$$

$$= \mathbb{1} \cdot U_I(t, t_0)|i\rangle \quad (0.8)$$

$$= \sum_n |n\rangle \langle n| U_I(t, t_0)|i\rangle \quad (0.9)$$

$$= \sum_n c_n(t) |n\rangle \quad (0.10)$$

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:

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

Was hier im Integral unterschlagen (oder unsichtbar) ist, dass die Kets und bras im WW-Bild von der Zeit Abhängen. Es kommen noch von beiden Seiten Exponential Funktionen heraus, falls man das Schrödinger Bild wieder betrachtet. Zweck dieser Übung ist, die Matrixelemente  $V_I$  aus dem Integral auszuklammern:

$$c_n^{(1)}(t) = \delta_{ni} - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^{t'} \langle n| e^{\frac{i}{\hbar} E_n t'} V_I e^{-\frac{i}{\hbar} E_i t'} |i\rangle dt' \quad (0.11)$$

$$= \delta_{ni} - \frac{i}{\hbar} \langle n| V_I |i\rangle \int_{t_0}^{t'} dt' e^{\frac{i}{\hbar} (E_n - E_i) t'} \quad (0.12)$$

$$= \delta_{ni} - \frac{i}{\hbar} \langle n| V_I |i\rangle \int_{t_0}^{t'} dt' e^{i\omega_{ni} t'} \quad (0.13)$$

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:

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

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

Die Übergangswahrscheinlichkeit ist das Betragsquadrat des Matrixelements:

$$p_{2 \rightarrow 1} = |c_1^{(1)}(t)|^2 = \frac{\alpha^2}{9\hbar^2\omega^2} (e^{i3\omega t} - 1)(e^{-i3\omega t} - 1) \quad (0.14)$$

$$= \frac{\alpha^2}{9\hbar^2\omega^2} (1 - e^{i3\omega t} - e^{-i3\omega t} + 1) \quad (0.15)$$

$$= \frac{\alpha^2}{9\hbar^2\omega^2} (2 - (e^{i3\omega t} + e^{-i3\omega t})) \quad (0.16)$$

$$= \frac{2\alpha^2}{9\hbar^2\omega^2} (1 - \cos(3\omega t)) \quad (0.17)$$