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:

$$\begin{aligned} |1\rangle &= |1\rangle^{(0)} + \frac{\langle 2|V|1\rangle}{E_1^{(0)} - E_2^{(0)}} |2\rangle^{(0)} + \frac{\langle 3|V|1\rangle}{E_1^{(0)} - E_3^{(0)}} |3\rangle^{(0)} && (0.1) \\ &= |1\rangle^{(0)} + \frac{\alpha}{\hbar\omega 2 - \hbar\omega 5} |2\rangle^{(0)} + \frac{\beta}{\hbar\omega 2 - \hbar\omega 6} |3\rangle^{(0)} && (0.2) \\ &= |1\rangle^{(0)} - \frac{\alpha}{\hbar\omega 3} |2\rangle^{(0)} - \frac{\beta}{\hbar\omega 4} |3\rangle^{(0)} && (0.3) \\ & && (0.4) \end{aligned}$$

Für die Energie bis zu der zweiter Ordnung gilt:

$$\begin{aligned} E_n &= E_n^{(0)} + E_n^{(1)} + E_n^{(2)} && (0.5) \\ &= E_n^{(0)} + \langle n|V|n\rangle + \sum_{k \neq n} \frac{|\langle k|V|n\rangle|^2}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}} && (0.6) \end{aligned}$$

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:

$$\begin{aligned}
|i, t_0, t\rangle_I &= U_I(t,t_0)|i\rangle && (0.7)\\
&= \mathbb{1}\cdot U_I(t,t_0)|i\rangle && (0.8)\\
&= \sum_n |n\rangle\langle n|U_I(t,t_0)|i\rangle && (0.9)\\
&= \sum_n c_n(t)|n\rangle && (0.10)
\end{aligned}$$

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:

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

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 Exponetial Funktionen heraus, falls man das Schrödinger Bild wieder betrachtet. Zweck dieser Übung ist, die Matrixelemente V_I aus dem Integral auszuklammern:

$$\begin{aligned}
c_n^{(1)}(t) &= \delta_{ni} - \frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t'}\langle n|e^{\frac{i}{\hbar}E_n t'}V_I e^{-\frac{i}{\hbar}E_i t'}|i\rangle dt' && (0.11)\\
&= \delta_{ni} - \frac{i}{\hbar}\langle n|V_I|i\rangle\int_{t_0}^{t'} dt' e^{\frac{i}{\hbar}(E_n - E_i)t'} && (0.12)\\
&= \delta_{ni} - \frac{i}{\hbar}\langle n|V_I|i\rangle\int_{t_0}^{t'} dt e^{i\omega_{ni}t'} && (0.13)
\end{aligned}$$

Mit $\omega_{ni} = \frac{i}{\hbar}(E_n - E_i)$.
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:

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

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

Die Übergangswahrscheinlichkeit ist das Betragsquadrat des Matrixelements:

$$\begin{aligned}
p_{2\to 1} = |c_1^{(1)}(t)|^2 &= \frac{\alpha^2}{9\hbar^2\omega^2}(e^{i3\omega t} - 1)(e^{-i3\omega t} - 1) && (0.14)\\
&= \frac{\alpha^2}{9\hbar^2\omega^2}(1 - e^{i3\omega t} - e^{-i3\omega t} + 1) && (0.15)\\
&= \frac{\alpha^2}{9\hbar^2\omega^2}(2 - (e^{i3\omega t} + e^{-i3\omega t})) && (0.16)\\
&= \frac{2\alpha^2}{9\hbar^2\omega^2}(1 - cos(3\omega t)) && (0.17)
\end{aligned}$$