

Zeitabhängige Störungstheorie

Wir betrachten einen Hamiltonoperator der aus einem zeitunabhängigen Teil H_0 und einer zeitabhängigen Störung $V(t)$ besteht.

$$H = H_0 + V(t) \quad (1)$$

Die Eigenzustände von H_0 sind gegeben durch

$$H_0|n\rangle = E_n|n\rangle \quad (2)$$

Da der gesamte Hamiltonoperator zeitabhängig ist gibt es keine stationäre Zustände. Deswegen betrachten wir die Übergangswahrscheinlichkeiten von einem Zustand $|n\rangle$ zu einem Zustand $|m\rangle$. Wir definieren den Zustand $|\alpha\rangle$ den wir dann nach den Eigenzuständen $|n\rangle$ des H_0 -Operators entwickeln

$$|\alpha\rangle = \mathbb{1}|\alpha\rangle = \sum_n |n\rangle \underbrace{\langle n|\alpha\rangle}_{c_n} = \sum_n c_n |n\rangle \quad (3)$$

Die Zeitenwicklung des Zustands $|\alpha\rangle$ ist gegeben durch

$$|\alpha, t\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar}Ht}|\alpha\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar}H_0t}e^{-\frac{i}{\hbar}V(t)t}|\alpha\rangle \stackrel{(3)}{=} e^{-\frac{i}{\hbar}H_0t}e^{-\frac{i}{\hbar}V(t)t}\sum_n c_n |n\rangle \quad (4)$$

$$= \sum_n c_n e^{-\frac{i}{\hbar}V(t)t}e^{-\frac{i}{\hbar}H_0t}|n\rangle \quad (5)$$

$$= \sum_n \underbrace{c_n e^{-\frac{i}{\hbar}V(t)t}}_{c_n(t)} e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t}|n\rangle \quad (6)$$

Damit lassen sich die zeitabhängigen Eigenzustände des gesamten Hamiltonoperators schreiben als

$$|\alpha, t\rangle = \sum_n c_n(t) e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t}|n\rangle \quad (7)$$

Aus der Gleichung (4) sieht man dass die Zeitabhängigkeit von c_n nur von $V(t)$ verursacht wird. Desweiteren lässt sich die Wahrscheinlichkeit den Zustand $|n\rangle$ zu finden mit $|c_n(t)|^2$ berechnen.

Wechselwirkungsbild

In der Zeitabhängigen Störungstheorie ist es zweckmäßig vom Schrödingerbild in Wechselwirkungsbild zu wechseln. Dabei hat das WW-Bild folgende Eigenschaften. Für ein Zustand im WW-Bild gilt

$$|\alpha, t\rangle_I = e^{iH_0t/\hbar}|\alpha, t\rangle_S \quad (8)$$

Für ein Operator gilt

$$A_I(t) = e^{iH_0t/\hbar}A_S e^{-iH_0t/\hbar} \quad (9)$$

Wir wollen eine schrödinger-artige Gleichung im WW-Bild herleiten

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial}{\partial t}|\alpha, t_0; t\rangle_I &= i\hbar \frac{\partial}{\partial t}(e^{\frac{i}{\hbar}H_0t}|\alpha, t_0, t\rangle_S) \\ &= i\hbar \left(\frac{i}{\hbar}H_0 e^{\frac{i}{\hbar}H_0t}|\alpha, t_i, t\rangle_S + e^{\frac{i}{\hbar}H_0t} \underbrace{\frac{\partial}{\partial t}|\alpha, t_0, t\rangle_S}_{\frac{1}{i\hbar}(H_0+V)|\alpha, t_0, t\rangle_S} \right) \quad \text{mit SG: } H|\psi(t)\rangle = i\hbar \frac{\partial}{\partial t}|\psi(t)\rangle \\ &= -H_0 e^{\frac{i}{\hbar}H_0t}|\alpha, t_i, t\rangle_S + e^{\frac{i}{\hbar}H_0t}(H_0 + V)|\alpha, t_0; t\rangle_S \\ &= e^{\frac{i}{\hbar}H_0t}V \cdot \mathbb{1} \cdot |\alpha, t_0; t\rangle_S \\ &= \underbrace{e^{\frac{i}{\hbar}H_0t}V e^{-\frac{i}{\hbar}H_0t}}_{V_I} \cdot \underbrace{e^{\frac{i}{\hbar}H_0t}|\alpha, t_0; t\rangle_S}_{|\alpha, t_0; t\rangle_I} \end{aligned} \quad (10)$$

Damit lautet die schrödinger-artige Gleichung im WW-Bild

$$\boxed{i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\alpha, t_0; t\rangle_I = V_I |\alpha, t_0; t\rangle_I} \quad (11)$$

Man sieht dass diese Gleichung unabhängig von dem stationäre Anteil des Hamiltonoperators H_0 ist.

Lösung der schrödinger-artigen Gleichung

Um die zeitabhängigen Koeffizienten $c_n(t)$ zu bestimmen und damit auch die Wahrscheinlichkeit das System in einem bestimmten Zustand n berechnen zu können müssen die schrödinger-artigen Gleichung (11) wie folgt umschreiben

$$\begin{aligned} \langle n | \cdot | \quad i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\alpha, t_0; t\rangle_I &= V_I |\alpha, t_0; t\rangle_I \\ i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \langle n | \alpha, t_0; t\rangle_I &= \langle n | V_I | \mathbb{1} | \alpha, t_0; t\rangle_I \\ i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \underbrace{\langle n | \alpha, t_0; t\rangle_I}_{c_n(t)} &= \sum_m \langle n | V_I | m\rangle \underbrace{\langle m | \alpha, t_0; t\rangle_I}_{c_m(t)} \\ i\hbar \frac{\partial}{\partial t} c_n(t) &= \sum_m \langle n | V_I | m\rangle c_m(t) \end{aligned} \quad (12)$$

Sehen uns das Matrixelement $\langle n | V_I | m\rangle c_m(t)$ genauer an

$$\begin{aligned} \langle n | V_I | m\rangle &= \underbrace{\langle n | e^{\frac{i}{\hbar} H_0 t}}_{\langle n | e^{\frac{i}{\hbar} E_n t}} V(t) \underbrace{e^{-\frac{i}{\hbar} H_0 t} | m\rangle}_{e^{-\frac{i}{\hbar} E_m t} | m\rangle} \\ &= \langle n | V(t) | m\rangle e^{\frac{i}{\hbar} (E_n - E_m) t} \\ &= V_{nm}(t) e^{i\omega_{nm} t} \end{aligned} \quad (13)$$

Damit erhalten wir mit der Abkürzung $\omega_{nm} = -\omega_{mn} = \frac{1}{\hbar} (E_n - E_m)$ ein System gekoppelter Differentialgleichungen das es zu lösen gilt

$$\boxed{i\hbar \frac{\partial}{\partial t} c_n(t) = \sum_m V_{nm}(t) e^{i\omega_{nm} t} c_m(t)} \quad (14)$$

In Matrixschreibweise sieht die Gleichung (14) folgendermaßen aus

$$i\hbar \begin{pmatrix} \dot{c}_1 \\ \dot{c}_2 \\ \vdots \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} V_{11} & V_{12} e^{i\omega_{12} t} & \cdot & \cdot & \cdot \\ V_{21} e^{i\omega_{21} t} & V_{22} & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \vdots \end{pmatrix} \quad (15)$$

Die gekoppelte Differentialgleichung (14) ist für hinreichend einfache Systeme mit endlich vielen Zuständen eventuell exakt lösbar. Für Systeme die nicht exakt lösbar sind wendet man die Zeitabhängige Störungsrechnung an

Zeitabhängige Störungsrechnung

Wir führen den Zeitevolutionsoperator $U(t, t_0)$ ein, der im WW-Bild eine Zeittransformation eines zeitunabhängigen Ket durchführt

$$|\alpha, t_0; t\rangle_I = U_I(t, t_0) |\alpha, t_0; t_0\rangle_I \quad (16)$$