

## 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

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

Einsetzen in der Gleichung (16) in die Schrödingerartige Gleichung (11) ergibt

$$\begin{aligned}
i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\alpha, t_0; t\rangle_I &= V_I |\alpha, t_0; t\rangle_I \\
i\hbar \frac{\partial}{\partial t} U_I(t, t_0) |\alpha, t_0; t_0\rangle_I &= V_I U_I(t, t_0) |\alpha, t_0; t_0\rangle_I \\
|\alpha, t_0; t_0\rangle_I \cdot i\hbar \frac{\partial}{\partial t} U_I(t, t_0) &= V_I U_I(t, t_0) |\alpha, t_0; t_0\rangle_I \\
{}_I \langle \alpha, t_0; t_0 | \cdot \quad |\alpha, t_0; t_0\rangle_I \cdot i\hbar \frac{\partial}{\partial t} U_I(t, t_0) &= V_I U_I(t, t_0) |\alpha, t_0; t_0\rangle_I
\end{aligned} \tag{17}$$

Damit erhalten wir eine DGL die nicht mehr vom Zustand  $|\alpha, t_0; t\rangle_I$  abhängig ist

$$\Rightarrow \boxed{i\hbar \frac{\partial}{\partial t} U_I(t, t_0) = V_I U(t, t_0)} \tag{18}$$

Um diese DGL zu lösen integrieren wir die Gleichung (18) auf beiden Seiten von  $t_0$  bis  $t$  nach  $dt$  mit der Anfangsbedingung  $U(t_0, t_0) = 1$

$$\begin{aligned}
i\hbar \int_{t_0}^t dt' \frac{\partial}{\partial t} U_I(t', t_0) &= \int_{t_0}^t dt' V_I U(t', t_0) \\
i\hbar \left( U_I(t, t_0) - \underbrace{U_I(t_0, t_0)}_1 \right) &= \int_{t_0}^t dt' V_I U(t', t_0)
\end{aligned} \tag{19}$$

Damit erhalten wir eine Integralgleichung, die den Vorteil hat, da  $V_I$  klein ist, kann man sie iterativ lösen (damit kleine Glieder vernachlässigt werden können).

$$U_I^{(n)}(t, t_0) = 1 - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t dt' V_I U^{(n-1)}(t', t_0) \tag{20}$$

Damit lauten der Zeitevolutionsoperator in verschiedenen Störungsordnungen

$$U_I^{(0)}(t, t_0) = U_I^{(0)}(t_0, t_0) = 1 \tag{21}$$

$$U_I^{(1)}(t, t_0) = 1 - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t dt' V_I U^{(0)}(t', t_0) = 1 - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t dt' V_I \tag{22}$$

$$U_I^{(2)}(t, t_0) = 1 - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t dt' V_I U^{(1)}(t', t_0) = 1 - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t dt' V_I \left( 1 - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^{t'} dt'' V_I \right) \tag{23}$$

$$= 1 - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t dt' V_I(t') + \frac{1}{\hbar^2} \int_{t_0}^t dt' V_I(t') \int_{t_0}^{t'} dt'' V_I(t'') \tag{24}$$

Man erhält die sogenannte *DYSON-Reihe* für  $U_I^{(\infty)}$

$$\boxed{U_I(t, t_0) = T \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-i)^n}{n! \hbar^n} \int_{t_0}^t dt' V(t') \cdots \int_{t_0}^{t^n} dt^n V(t^n) = T e^{-\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t dt' V(t')}} \tag{25}$$

Dabei ist  $T$  der Zeitordnungsoperator, der dafür sorgt, dass die späteren Zeiten nach links und die früheren nach rechts kommen, d.h. er sortiert von höheren Zeiten zu kleineren Zeiten.

Wir wollen nun die Übergangswahrscheinlichkeit von einem Inertialzustand  $|i\rangle$  zu einem Endzustand  $|n\rangle$  bestimmen. Dazu betrachten wir den Inertialzustand bei  $t = t_0$  mit, den wir dann mit Hilfe des Zeitevolutionsoperators für beliebige Zeiten entwickeln (vergleiche mit Gleichung (16))

$$|i, t_0, t\rangle_I = U_I(t, t_0) |i\rangle = \mathbb{1} \cdot U_I(t, t_0) |i\rangle = \sum_n |n\rangle \underbrace{\langle n | U_I(t, t_0) | i \rangle}_{c_n} = \sum_n c_n(t) |n\rangle \tag{26}$$

Nun möchten wir die Übergangskoeffizienten  $c_n(t)$  des Zeitordnungsoperators  $U_I(t, t_0)$  bestimmen.

$$c_n(t) = \langle n|U_I(t, t_0)|i\rangle = \langle n|Te^{-\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t dt' V_I(t')}|i\rangle \quad (27)$$

Für  $U_I$  in 2. Ordnung Störungstheorie, siehe Gleichung (24), lautet  $c_n(t)$

$$\begin{aligned} c_n(t) &= \langle n|i\rangle - \frac{i}{\hbar} \langle n|\int_{t_0}^t V_I(t')dt'|i\rangle + \left(\frac{i}{\hbar}\right)^2 \langle n|\int_{t_0}^t dt' \int_{t_0}^{t'} V_I(t')V_I(t'')dt''|i\rangle \\ &= \langle n|i\rangle - \frac{i}{\hbar} \langle n|\int_{t_0}^t V_I(t')dt'|i\rangle + \left(\frac{i}{\hbar}\right)^2 \langle n|\int_{t_0}^t dt' \int_{t_0}^{t'} V_I(t') \cdot \sum_m |m\rangle\langle m| \cdot V_I(t'')dt''|i\rangle \\ &= \delta_{ni} + \left(\frac{-i}{\hbar}\right) \int_{t_0}^t V_{ni}(t')e^{i\omega_{ni}t'}dt' + \left(\frac{-i}{\hbar}\right)^2 \sum_m \int_{t_0}^t dt' \int_{t_0}^{t'} V_{nm}(t')e^{i\omega_{ni}t'}V_{mi}(t'')e^{i\omega_{ni}t''}dt'' \\ &= c_n^{(0)}(t) + c_n^{(1)}(t) + c_n^{(2)}(t) \end{aligned} \quad (28)$$

Damit erhalten wir eine Übergangswahrscheinlichkeit von Zustand  $|i\rangle$  zu einem beliebigen Zustand  $|n\rangle$  in 2-ter Näherung zeitabhängigen Störungstheorie

$$\boxed{P(i \rightarrow n) = |c_n^{(0)} + c_n^{(1)}(t) + c_n^{(2)}(t)|^2} \quad (29)$$