VIII. NÄHERUNGSVERFAHREN

a) Zeitunabhängige (stationäre) Störungstheorie

Sinn und Zweck: klar!

Anwendbarkeit: $H = H_0 + H_1$ $\quad$ Kontrolle: $H_1 = \lambda V$

H_0: bekannt; H_1: „klein" (in welchem Sinne?); λ: reeller Störparameter (z.B. $\lambda \in [0,1]$)

Fragestellung:

(8.1) $$\begin{cases} H_0|\psi^0\rangle = E^0|\psi^0\rangle & \text{unterdrücke Quantenzahlen: } E_n^{(0)}, |\psi_n^{(0)}\rangle \ldots \\ (H_0+\lambda V)|\psi\rangle = E|\psi\rangle & \Delta \equiv E - E^0 \text{ shift} \end{cases}$$

unterdrückt!

gegeben das Spektrum $\{E^0, |\psi^0\rangle\}$ von H^0, läßt sich $\{E(\lambda), |\psi(\lambda)\rangle\}$ in λ um $\lambda=0$ entwickeln, d.h. durch die ungestörten Größen ausdrücken?

Formale Lösung:

(8.2) $(E^0 - H_0)|\psi\rangle = (\lambda V - \Delta)|\psi\rangle$ $\rightarrow$ Rayleigh-Schrödinger (RS)

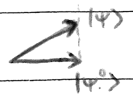
(8.3) $(E - H_0)|\psi\rangle = \lambda V|\psi\rangle$ $\rightarrow$ Brillouin-Wigner (BW)

$\times\langle\psi^0|$ $\xrightarrow{RS}$ $\langle\psi^0|E^0-E^0|\psi\rangle = 0 = \langle\psi^0|\lambda V - \Delta|\psi\rangle \rightarrow (\lambda V-\Delta)|\psi\rangle \perp |\psi^0\rangle$

$\xrightarrow{BW}$ $\langle\psi^0|E-E^0|\psi\rangle \equiv \Delta\langle\psi^0|\psi\rangle = \langle\psi^0|\lambda V|\psi\rangle$

(8.4) def. Projektion $\perp |\psi^0\rangle$: $P \equiv P^\perp_{\psi^0} := 1 - |\psi^0\rangle\langle\psi^0| = \sum_{n(\neq\psi)} |n^0\rangle\langle n^0|$ auf $\mathcal{H}^\perp_{\psi^0}$

d.h. $P|\psi^0\rangle = 0$



wähle ungewöhnliche Normierung: $\langle\psi^0|\psi^0\rangle = 1$, aber $\langle\psi^0|\psi\rangle = 1$, d.h. $\langle\psi^0|\delta\psi\rangle = 0$ (8.5)

(damit ist $\langle\psi|\psi\rangle = Z^{-1}(\lambda) \neq 1$, wird später korrigiert; Problem falls $\langle\psi^0|\psi\rangle = 0$)

somit: $\Delta \equiv E - E^0 = \langle\psi^0|\lambda V|\psi\rangle$ (8.6)

exakt, aber implizit, da $|\psi(\lambda)\rangle$ zu ermitteln! Kommt gleich!

für Δ zur $O(\lambda^s)$ brauche $|\psi\rangle$ zur $O(\lambda^{s-1})$

$\boxed{RS}$ (8.2) $\rightsquigarrow$

$$(E^0 - H_0)|\psi\rangle = (\lambda V - \Delta)|\psi\rangle = P(\lambda V - \Delta)|\psi\rangle$$

$(E^0-H_0)^{-1}$ ist wohldefiniert auf $\mathcal{H}^{\perp}_{\psi^0}$ „Resolvente" $R_0(E^0)$

„löse" (RS) durch Inversion auf $\mathcal{H}^{\perp}_{\psi^0}$:

$$P|\psi\rangle = \frac{1}{E^0-H_0} \underbrace{P}_{\text{eigentlich überflüssig}} (\lambda V - \Delta)|\psi\rangle \qquad (\perp |\psi^0\rangle)$$

erweitere auf ganz $\mathcal{H}$ durch Hinzufügen einer $|\psi^0\rangle$-Komponente

$$|\psi\rangle = c|\psi^0\rangle + \frac{1}{E^0-H_0} P(\lambda V - \Delta)|\psi\rangle$$

Normierung : $1 = \langle\psi^0|\psi\rangle = c\langle\psi^0|\psi^0\rangle + \emptyset \rightsquigarrow c = 1$

$$|\psi\rangle = |\psi^0\rangle + \frac{1}{E^0-H_0} P(\lambda V - \Delta)|\psi\rangle \qquad (RS)' \quad (8.7)$$

exakte Gleichung, aber implizit: $|\psi\rangle$ rechts, auch $\Delta(\lambda)$ zu bestimmen! ($\rightarrow$ (8.6.1))

Iteration möglich:

$$|\psi\rangle = |\psi^0\rangle + \underbrace{\frac{1}{E^0-H_0} P(\lambda V - \Delta)|\psi^0\rangle}_{\rightarrow \emptyset \text{ weil } P|\psi^0\rangle = 0} + \frac{1}{E^0-H_0} P(\lambda V - \underbrace{\Delta}_{\text{erstmals wichtig!}}) \frac{1}{E^0-H_0} \underbrace{P(\lambda V - \Delta)|\psi^0\rangle}_{\rightarrow\emptyset} + \dots$$

$$\text{aber } \Delta \overset{(8.6)}{=} \langle\psi^0|\lambda V|\psi^0\rangle + \langle\psi^0|\lambda V \frac{1}{E^0-H_0} P(\lambda V - \underbrace{\Delta)|\psi^0\rangle}_{\rightarrow\emptyset} + \dots$$

explizit durch Einsetzen von $P = \sum_n' |n^0\rangle\langle n^0|$ $(\perp|\psi^0\rangle)$, mit $H_0|n^0\rangle = E^0_n|n^0\rangle$

$$|\psi\rangle = |\psi^0\rangle + \sum_n' \frac{1}{E^0-E^0_n} |n^0\rangle\langle n^0|\lambda V - \underbrace{\Delta|\psi^0\rangle}_{\rightarrow \emptyset \text{ wegen } \langle n^0|\psi^0\rangle = 0} + \dots$$

$$= |\psi^0\rangle + \lambda \sum_n' |n^0\rangle \frac{\langle n^0|V|\psi^0\rangle}{E^0-E^0_n} + \mathcal{O}(\lambda^2) \qquad (8.8)$$

$$E = E^0 + \langle\psi^0|\lambda V|\psi^0\rangle + \sum_n' \langle\psi^0|\lambda V|n^0\rangle \frac{1}{E^0-E^0_n} \langle n^0|\lambda V - \underbrace{\Delta}_{\rightarrow\emptyset}|\psi^0\rangle$$

$$= E^0 + \lambda \underbrace{\langle\psi^0|V|\psi^0\rangle}_{\text{EW von V im ungest. Zustand}} + \lambda^2 \sum_n' \frac{\overbrace{|\langle n^0|V|\psi^0\rangle|^2}^{\text{Mischung!}}}{\underbrace{E^0-E^0_n}_{\text{Energienenner}}} + \mathcal{O}(\lambda^3) \qquad (8.9)$$

Konvergenz? ~~Vielfach~~ keine, Reihe ist asymptotisch

Kriterium: $\lambda \left| \frac{\langle\psi^0|V|n^0\rangle}{E^0-E^0_n} \right|$ „genügend klein" $\forall n$

$\boxed{BW}$ (8.3) $\rightarrow$

$$(E - H_0)|\psi\rangle = \lambda V|\psi\rangle = |\psi^0\rangle\langle\psi^0|\lambda V|\psi\rangle + P\lambda V|\psi\rangle$$

$(E-H_0)^{-1}$ ist wohldefiniert solange $E \notin \mathrm{spec}(H_0)$, also $\lambda \neq 0$, diskretes Spektrum

„löse" (BW) durch Inversion:

$$|\psi\rangle = \frac{1}{E-H_0}|\psi^0\rangle\langle\psi^0|\lambda V|\psi\rangle + \frac{1}{E-H_0}P\lambda V|\psi\rangle$$

$$\overset{(8.6)}{=} \frac{1}{\Delta}|\psi^0\rangle \cdot \Delta + \frac{1}{E-H_0}P\lambda V|\psi\rangle$$

$$|\psi\rangle = |\psi^0\rangle + \frac{1}{E-H_0}P\lambda V|\psi\rangle \qquad (BW)' \qquad (8.10)$$

($\rightarrow$ (8.6))

exakte Gleichung, aber implizit: $|\psi\rangle$ rechts, und E zu bestimmen!
Vorteilhaft, wenn die exakten E-Werte anderweitig bekannt sind.

$$\left[\; |\psi\rangle = |\psi^0\rangle + \frac{1}{E^0 - H_0 + \Delta}P\lambda V|\psi\rangle \qquad \text{vergleiche mit (8.7)!} \;\right]$$

Iteration von (8.10):

$$|\psi\rangle = |\psi^0\rangle + \frac{1}{E-H_0}P\lambda V|\psi^0\rangle + \frac{1}{E-H_0}P\lambda V\frac{1}{E-H_0}P\lambda V|\psi^0\rangle + \ldots$$

expliziter:

$$|\psi\rangle = |\psi^0\rangle + \lambda \sum_n{}' |n^0\rangle \frac{\langle n^0|V|\psi^0\rangle}{E-E_n^0} + \mathcal{O}(\lambda^2) \qquad (8.11)$$

$\rightarrow$ $|\psi\rangle$ ausgedrückt durch $\{|n^0\rangle, E_n^0\}'$ und $|\psi^0\rangle$, $E(\lambda)$! (statt E_0)
(BW) konvergiert schneller als (RS), hat aber implizite λ-Abhängigkeit in E
Einsetzen von $E = E^0 + \mathcal{O}(\lambda)$ gibt (RS) zurück („Umsortieren")

Wellenfunktionsrenormierung:

normiere $|\bar\psi\rangle = Z^{1/2}(\lambda)|\psi\rangle$ so daß $\langle\bar\psi|\bar\psi\rangle = 1$

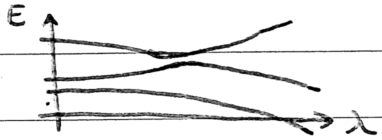
[$\rightarrow$ $\langle\psi^0|\bar\psi\rangle = Z^{1/2}\langle\psi^0|\psi\rangle = Z^{1/2}$ $\rightarrow$ $Z = |\langle\psi^0|\bar\psi\rangle|^2 =$ W., $|\psi\rangle$ in $|\psi^0\rangle$ zu finden]

$$\rightarrow\; Z^{-1} = \langle\psi|\psi\rangle \overset{(8.8)}{=} \langle\psi^0|\psi^0\rangle + \lambda^2 \sum_n{}' \frac{|\langle n^0|V|\psi^0\rangle|^2}{(E^0-E_n^0)^2} + \mathcal{O}(\lambda^3)$$

$$\rightarrow\; Z = 1 - \lambda^2 \sum_n{}' \frac{|\langle n^0|V|\psi^0\rangle|^2}{(E^0-E_n^0)^2} + \mathcal{O}(\lambda^3) < 1, \quad \text{allg.: } Z = \frac{\partial E}{\partial E^0} \qquad (8.12)$$

Bemerkungen:

- nicht immer sind E und $|\psi\rangle$ nach λ entwickelbar
  (nichtanalytische Terme wie $e^{-1/\lambda V}$ sind in Störungstheorie unsichtbar)
- für den Grundzustand ist die Verschiebung zweiter Ordnung negativ
  (Energie-Nenner $E^0 - E_n^0$ dann negativ!)
- falls Matrixelemente von V vergleichbar sind, kommen die größten Beiträge zum E-Shift 2. Ordnung von nahen Niveaus
  (Energie-Nenner klein, wenn E_n^0 nahe E^0)
- $E_m^0 > E_n^0 \rightarrow$ 2. Ordnung-Beitrag von $|n^0\rangle$ zu $E = E_m$ ist positiv, der von $|m^0\rangle$ zu $E = E_n$ ist negativ $\rightarrow$ Abstoßung der Niveaus!
- Nichtüberkreuzungs-Theorem: getrennte Niveaus treffen sich als Funktion von λ nicht (jenseits Störungstheorie)



nahe solcher Fast-Kreuzungen ist Störungstheorie schlecht (große Nenner)

- $\sum_n'$ ist im kontinuierlichen Teil des Spektrums durch entsprechendes Integral zu ersetzen
  (kein Problem, solange E einen Abstand vom Kontinuum hat)
- falls E selbst im Kontinuum liegt: $\sum_n' \frac{1}{E^0 - E_n^0} \rightarrow \int \frac{dE'}{E^0 - E'}$
- wir haben stillschweigend angenommen, daß H_0 nicht entartet!
  (falls Entartung vorliegt, ist $\lim_{\lambda \to 0} |\psi\rangle = |\psi^0\rangle$ nicht eindeutig, und Energie-Nenner divergieren im Entartungsraum zu E!)

Erweiterung auf den entarteten Fall (RS):

E^0 sei entartet (g-fach), mit Eigenraum ($\mathcal{H}_{E^0}$) aufgespannt durch $\{|\psi_i^0\rangle, i=1,\dots,g\}$.

Entwicklungsparameter $\lambda\left|\frac{\langle\psi^0|V|n^0\rangle}{E^0-E_n^0}\right|$ divergiert für $|n^0\rangle\in\mathcal{H}_{E^0}$,

es sei denn, daß $\langle\psi^0|V|n^0\rangle=0$ für solche $|n^0\rangle$ ($\neq|\psi^0\rangle$) !

Nutze Freiheit, die Basis in $\mathcal{H}_{E^0}$ geeignet zu wählen!

$[H_0,V]\neq 0$ (sonst trivial), aber $[H_0,V]\big|_{\mathcal{H}_{E^0}}=0$ weil $H_0\big|_{\mathcal{H}_{E^0}}=E_0\mathbb{1}\big|_{\mathcal{H}_{E^0}}$

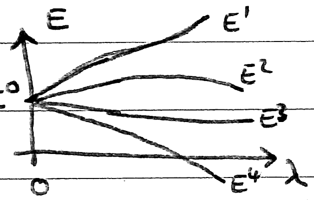
Auf E^0-Eigenraum können H_0 und V gemeinsam diagonalisiert werden.

Wähle Basis $\{|\psi_\alpha^0\rangle, \alpha=1,\dots,g\}$ so daß $\langle\psi_\alpha^0|V|\psi_\beta^0\rangle = v_\alpha\delta_{\alpha\beta}$. (8.13)

Technisch: löse EW-Problem für V in $\mathcal{H}_{E^0}$,

$$\det_{E^0}(V-v_\alpha\mathbb{1})=0 \qquad \& \qquad V|\psi_\alpha^0\rangle = v_\alpha|\psi_\alpha^0\rangle \qquad (8.14)$$

Dies sind geeignete Ausgangszustände für die Störungstheorie:



- die Entartung wird aufgehoben durch die Störung,
  $\Delta_\alpha = E_\alpha - E^0 = \langle\psi_\alpha^0|\lambda V|\psi_\alpha\rangle = \lambda v_\alpha + O(\lambda^2)$ (8.15)
- $\lim_{\lambda\to 0}|\psi_\alpha\rangle = |\psi_\alpha^0\rangle$ (genau diese LK der $|\psi_i^0\rangle$) [sonst: Änderung $|\psi_\alpha\rangle-|\psi_i^0\rangle$ nicht klein, Sprung!, nicht diffbar!]
- alle Formeln können übernommen werden mit der Ersetzung
  $P=\sum_{n\neq\psi}|n^0\rangle\langle n^0| \longmapsto P=\sum_{|n^0\rangle\notin\mathcal{H}_{E^0}}|n^0\rangle\langle n^0|$ auf $\mathcal{H}_{E^0}^{\perp}$,

  d.h. $\sum_n{}'$ läuft nur über Zustände $\perp \mathcal{H}_{E^0}$ [falls Energien $\neq E^0$ entartet sind, kann nichtentartete Störungstheorie für E^0 benutzt werden]

Einfach: Diagonalisierung von V (auf $\mathcal{H}_{E^0}$) liefert bereits Energie-Shifts in $O(\lambda)$ sowie die richtigen Eigenkets in $O(1)$

Falls Entartung in $O(\lambda)$ nicht vollständig aufgehoben ($\exists\, v_\alpha=v_\beta$), muß im verbleibenden Entartungsfall auch V^2 diagonalisiert werden, evtl. weiter mit V^3 etc. solange, bis keine Entartung mehr! [i.a. aber Aufspaltung in $O(\lambda^2)$!]

Fast-Entartung: falls $\langle\psi_i^0|\lambda V|\psi_j^0\rangle \gg$ Level-Splitting,
dann ist entartete Störungstheorie gut, im umgekehrten Fall nichtentartete!

b) Anwendungen

Übung

(i) Zwei-Niveau-System

$$H = H_0 + \lambda V = \begin{pmatrix} E_1^0 & 0 \\ 0 & E_2^0 \end{pmatrix} + \lambda \begin{pmatrix} 0 & \Gamma \\ \Gamma^* & 0 \end{pmatrix} \qquad \text{in } H_0\text{-Eigenbasis, } E_1^0 > E_2^0$$

$$= E_1^0 |1^0\rangle\langle 1^0| + E_2^0 |2^0\rangle\langle 2^0| + \lambda\Gamma |1^0\rangle\langle 2^0| + \lambda\Gamma^* |2^0\rangle\langle 1^0|$$

mit Wahl $V_{11} = V_{22} = 0$ (kann sonst in H_0 absorbiert werden)

und Notation $V_{12} = \Gamma$ (kann durch Phasenwahl von $|2^0\rangle$ zu $|1^0\rangle$ reell machen)

Störungsrechnung in λ sollte gut sein, wenn $\lambda|\Gamma| \ll |E_1^0 - E_2^0|$

rechne: $P_1 = |2^0\rangle\langle 2^0|$, $P_2 = |1^0\rangle\langle 1^0|$, $E_{12}^0 := E_1^0 - E_2^0$

$$|1\rangle = |1^0\rangle + \frac{1}{E_{12}^0}|2^0\rangle \lambda V_{21} + \frac{1}{E_{12}^0}|2^0\rangle(\overset{\mapsto 0}{\lambda V_{22}} - \Delta_1)\frac{1}{E_{12}^0}\lambda V_{21} + \dots$$

$$= |1^0\rangle + \frac{\lambda\Gamma^*}{E_{12}^0}|2^0\rangle\left(1 - \frac{\Delta_1}{E_{12}^0} + \frac{\Delta_1^2}{(E_{12}^0)^2} \mp \dots\right) = |1^0\rangle + \frac{\lambda\Gamma^*}{E_{12}^0 + \Delta_1}|2^0\rangle$$

$$|2\rangle = |2^0\rangle + \frac{\lambda\Gamma}{E_{21}^0}|1^0\rangle\left(1 - \frac{\Delta_2}{E_{21}^0} + \frac{\Delta_2^2}{(E_{21}^0)^2} \mp \dots\right) = |2^0\rangle + \frac{\lambda\Gamma}{E_{21}^0 + \Delta_2}|1^0\rangle$$

$$\Delta_1 = \overset{\mapsto 0}{\lambda V_{11}} + \lambda V_{12}\frac{1}{E_{12}^0}\lambda V_{21} + \lambda V_{12}\frac{1}{E_{12}^0}(\overset{\mapsto 0}{\lambda V_{22}} - \Delta_1)\frac{1}{E_{12}^0}\lambda V_{21} + \dots$$

$$= \frac{\lambda^2|\Gamma|^2}{E_{12}^0}\left(1 - \frac{\Delta_1}{E_{12}^0} \pm \dots\right) = \frac{\lambda^2|\Gamma|^2}{E_{12}^0 + \Delta_1} \qquad (\text{oder direkt } \Delta_1 = \langle 1^0|\lambda V|1\rangle)$$

$$\Delta_2 = \frac{\lambda^2|\Gamma|^2}{E_{21}^0}\left(1 - \frac{\Delta_2}{E_{21}^0} \pm \dots\right) = \frac{\lambda^2|\Gamma|^2}{E_{21}^0 + \Delta_2} \qquad (\text{oder direkt } \Delta_2 = \langle 2^0|\lambda V|2\rangle)$$

entweder Iterieren durch Einsetzen ~~der~~ rechten Seite in sich selbst (→ Kettenbrüche)

oder Lösen der quadratischen Gleichungen für $\Delta_{1,2}$:

$$\Delta_1(E_{12}^0 + \Delta_1) = \Delta_2(-E_{12}^0 + \Delta_2) \to (\Delta_1 + \Delta_2)(\Delta_1 - \Delta_2 + E_{12}^0) = 0 \to \underbrace{\Delta_1}_{>0} + \underbrace{\Delta_2}_{<0} = 0$$

↳ Schwerpunkt bleibt

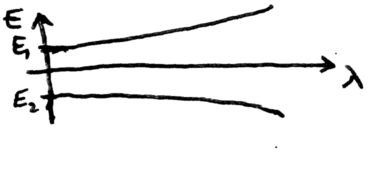
$$\Delta_1(E_{12}^0 + \Delta_1) = \lambda^2|\Gamma|^2 \to \Delta_1^2 + E_{12}^0\Delta_1 - \lambda^2|\Gamma|^2 = 0 \to$$

$$\Delta_1 = -\frac{E_{12}^0}{2}\left(1 - \sqrt{1 + \frac{4\lambda^2|\Gamma|^2}{(E_{12}^0)^2}}\right) \overset{\text{Taylor}}{=} \lambda^2\frac{|\Gamma|^2}{E_{12}^0} - \lambda^4\frac{|\Gamma|^4}{(E_{12}^0)^3} + 2\lambda^6\frac{|\Gamma|^6}{(E_{12}^0)^5} + \dots$$

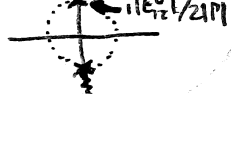
exakte Lösung: diagonalisiere $\begin{pmatrix} E_1^0 & \lambda\Gamma \\ \lambda\Gamma^* & E_2^0 \end{pmatrix}$

$$0 = \begin{vmatrix} E_1^0 - E & \lambda\Gamma \\ \lambda\Gamma^* & E_2^0 - E \end{vmatrix} = (E_1^0 - E)(E_2^0 - E) - \lambda^2|\Gamma|^2 \to E^2 - (E_1^0 + E_2^0)E + E_1^0E_2^0 - \lambda^2|\Gamma|^2 = 0$$

$$E_{1,2} = \frac{E_1^0 + E_2^0}{2} \pm \sqrt{\frac{(E_1^0 + E_2^0)^2}{4} - E_1^0E_2^0 + \lambda^2|\Gamma|^2} = \frac{E_1^0 + E_2^0}{2} \pm \sqrt{\frac{(E_{12}^0)^2}{4} + \lambda^2|\Gamma|^2} \quad ✓$$



Konvergenzradius der Störungsreihe in λ:
$\lambda|\Gamma| \le \frac{1}{2}E_{12}^0$



c) Zeitabhängige Störungstheorie

Zeitabhängige Störungen: $H = \underset{\text{bekannt}}{H_0} + \underset{\text{klein}}{V(t)}$

lassen sich nicht wie bisher behandeln: $\mathcal{U}(t) \neq e^{-\frac{i}{\hbar} H(t)\cdot t}$ oder $e^{-\frac{i}{\hbar}\int^t H(t')dt'}$

α) Differentialgleichung für $\mathcal{U}(t)$

$$i\hbar\, \partial_t \mathcal{U}(t) = H(t)\,\mathcal{U}(t) \qquad \text{mit} \quad \mathcal{U}(t=0) = \mathbb{1}$$

läßt sich formal für beliebiges $H(t)$ lösen:

$$\mathcal{U}(t) = \mathbb{1} - \frac{i}{\hbar}\int_0^t dt'\, H(t')\,\mathcal{U}(t') \qquad \text{Integralgleichung} \qquad (8.16)$$

Iteration:

$$\mathcal{U}(t) = \mathbb{1} - \frac{i}{\hbar}\int_0^t dt'\, H(t')\left[\mathbb{1} - \frac{i}{\hbar}\int_0^{t'} dt''\, H(t'')\,\mathcal{U}(t'')\right]$$

$$= \mathbb{1} - \frac{i}{\hbar}\int_0^t dt'\, H(t') + \left(\frac{-i}{\hbar}\right)^2 \int_0^t dt' \int_0^{t'} dt''\, H(t')H(t'') + \ldots$$

$$\ldots + \left(\frac{-i}{\hbar}\right)^n \int_0^t dt_1 \int_0^{t_1} dt_2 \ldots \int_0^{t_{n-1}} dt_n\, H(t_1)H(t_2)\ldots H(t_n) + \ldots \qquad (8.17)$$

Zeit-Ordnung: $T A(t)B(t') = \begin{cases} A(t)B(t') & t>t' \\ B(t')A(t) & t<t' \end{cases}$ $[H(t'),H(t'')] \neq 0$!

$$= \mathbb{1} - \frac{i}{\hbar}\int_0^t dt'\, H(t') + \frac{1}{2!}\left(\frac{-i}{\hbar}\right)^2 \int_0^t dt' \int_0^t dt''\, T\, H(t')H(t'') + \ldots$$

$$\ldots + \frac{1}{n!}\left(\frac{-i}{\hbar}\right)^n \int_0^t dt_1 \ldots \int_0^t dt_n\, T H(t_1)\ldots H(t_n) + \ldots$$

$$= T\, e^{-\frac{i}{\hbar}\int_0^t dt'\, H(t')} \qquad \text{„Dyson-Reihe"}$$

β) Schwierigkeit: Konvergenz unklar, da Entwicklung in Potenzen von H

Wenn jedoch $H = H_0(t) + V(t)$ (bekannt!), wobei das H_0-Problem gelöst und V klein ist, lassen sich die auf H_0 und auf V zurückgehenden Zeitabhängigkeiten trennen: WW-Bild (Schwinger-, Dirac-Bild)! Erinnerung:

$\boxed{t=0:\ \text{alle } |\psi\rangle \text{ gleich, kein Index!}}$

$$\langle\Omega\rangle(t) = \langle\psi|\mathcal{U}^+\Omega\,\mathcal{U}|\psi\rangle = \langle\psi|(\mathcal{U}^+\mathcal{U}_0)(\mathcal{U}_0^+\Omega\,\mathcal{U}_0)(\mathcal{U}_0^+\mathcal{U})|\psi\rangle$$

$$=: \langle\psi_I(t)|\Omega_I(t)|\psi_I(t)\rangle \qquad \text{mit} \quad \mathcal{U}_0 = e^{-\frac{i}{\hbar}H_0 t} \quad (\text{wenn } \partial_t H_0 = 0)$$

mit $\Omega_I(t) = \mathcal{U}_0^+(t)\,\Omega\,\mathcal{U}_0(t)$ (H_0-Heisenberg) & $|\psi_I(t)\rangle = \underbrace{(\mathcal{U}_0^+\mathcal{U})}_{\mathcal{U}_I}|\psi\rangle = \mathcal{U}_0^+|\psi(t)\rangle$

infinitesimal: $i\hbar\partial_t \Omega_I = [\Omega_I, H_0]$ & $i\hbar\partial_t|\psi_I\rangle = V_I|\psi_I\rangle$ mit $V_I \equiv \mathcal{U}_0^+ V\,\mathcal{U}_0$,

wegen $i\hbar\partial_t(\mathcal{U}_0^+\mathcal{U}) = i\hbar(\partial_t\mathcal{U}_0^+)\mathcal{U} + i\hbar\,\mathcal{U}_0^+(\partial_t\mathcal{U}) = (-\mathcal{U}_0^+H_0)\mathcal{U} + \mathcal{U}_0^+(H\mathcal{U}) = \mathcal{U}_0^+(H-H_0)\mathcal{U} = (\mathcal{U}_0^+V\mathcal{U}_0)\mathcal{U}_0^+\mathcal{U}$

γ) Störungsentwicklung

$U_0^\dagger V U_0$ (8.18)

löse $i\hbar\partial_t|\psi_I(t)\rangle = V_I(t)\,|\psi_I(t)\rangle$ mit Dyson-Reihe: $H(t)\to V_I(t)$, $U(t)\to|\psi_I(t)\rangle$

$U=U_0U_I$

$$|\psi_I(t)\rangle = T\,e^{-\frac{i}{\hbar}\int_0^t dt'\,V_I(t')}\,|\psi_I(0)\rangle = U_I(t)\,|\psi_I(0)\rangle$$

$$= |\psi_I(0)\rangle - \frac{i}{\hbar}\int_0^t dt'\,V_I(t')\,|\psi_I(0)\rangle + \left(\frac{-i}{\hbar}\right)^2\int_0^t dt'\int_0^{t'} dt''\,V_I(t')\,V_I(t'')\,|\psi_I(0)\rangle + \ldots \quad (8.19)$$

macht Sinn als Reihe, da in Potenzen von (kleinem) V_I → „Neumann-Reihe"

Übergänge $|a(t=0)\rangle \longrightarrow |b(t)\rangle$

Wahrscheinlichkeit $W_{|a\rangle\to|b\rangle}(t) = |\langle b(t)|a(t)\rangle|^2 = |\langle b(t)|\,U(t)\,|a(0)\rangle|^2$

Falls $|a(0)\rangle$ ($\hookrightarrow|a\rangle$) und $|b(t)\rangle$ ($\hookrightarrow U_0(t)|b\rangle$) H_0-Eigenkets sind, gilt wegen $U(t)=U_0(t)\,U_I(t)$

$$|\langle b(t)|U(t)|a(0)\rangle|^2 = |\langle b(t)|U_0^\dagger(-t)\,U_I(t)|a(0)\rangle|^2 = |\langle b|U_I(t)|a\rangle|^2 \quad \text{(sonst falsch!)}$$

Zeitentwicklung von H_0-Eigenket $|i^\circ\rangle$, d.h. $|\psi(0)\rangle = |i^\circ\rangle$:

$$|\psi(t)\rangle_I \equiv |i^\circ(t)\rangle_I = U_I(t)|i^\circ\rangle = \sum_n |n^\circ\rangle\langle n^\circ|U_I(t)|i^\circ\rangle = \sum_n c_n(t)\,|n^\circ\rangle$$

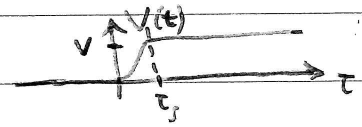
$$\underbrace{|\psi(t)\rangle_{(S)}}_{\text{Schrödinger}} = U_0(t)\,|\psi(t)\rangle_I = e^{-\frac{i}{\hbar}H_0 t}\sum_n c_n(t)\,|n^\circ\rangle = \sum_n c_n(t)\,e^{-\frac{i}{\hbar}E_n^0 t}\,|n^\circ\rangle \quad (8.20)$$

nichttriviale Aufgabe: berechne $c_n(t) = \langle n^\circ|U_I(t)|i^\circ\rangle = c_n^{(0)}(t) + c_n^{(1)}(t) + \ldots$

δ) Sudden Approximation (verkürzt)

(anderes Extrem: adiabatische Approximation)

$$V(t) = \begin{cases} 0 & t\le 0 \\ V=\text{konst.} & t\ge \tau_s \end{cases}$$ etwa



wobei $\tau_s \ll \tau_{ch}$ (charakt. Systemzeit)

$\exists$ stationäre Zustände vorher ($|n^\circ\rangle$) und nachher ($|\bar n\rangle$) mit

$|n^\circ(t)\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar}E_n^0 t}\,|n^\circ\rangle$ und $|\bar n(t)\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar}\bar E_n t}\,|\bar n\rangle$

sei das System im Zustand $|\psi(t)\rangle$ für $t<0$.

sudden approximation ($\tau_s\to 0$): keine Änderung bei $t=0$, d.h. $|\psi(0+)\rangle = |\psi(0-)\rangle$

dann gilt für $t>0$:

$$|\psi(t)\rangle = \sum_{\bar n} e^{-\frac{i}{\hbar}\bar E_n t}\,|\bar n\rangle\langle\bar n|\psi(0)\rangle$$

[nur gut für diskrete Zustände $|\bar n\rangle$, da im Kontinuum $\tau_s \not\ll \tau_{ch}$]

Übergangswahrscheinlichkeit von $|\psi\rangle$ nach $|n\rangle$:

$$W_{|\psi\rangle\to|n\rangle}(t) = |\langle\bar n|\psi(t>0)\rangle|^2 = |e^{-\frac{i}{\hbar}\bar E_n t}\langle\bar n|\psi(0)\rangle|^2 = \underbrace{|\langle\bar n|\psi(0)\rangle|^2}_{\text{Überlapp}}$$

ε) Übergänge erster Ordnung

$$W_{|m^0\rangle\to|n^0\rangle}(t) = \left|\langle n^0|U_I(t)|m^0\rangle\right|^2 = \left|c^{(0)}_{nm} + c^{(1)}_{nm} + \dots\right|^2$$

$$= \left|\langle n^0|m^0\rangle - \frac{i}{\hbar}\langle n^0|\int_0^t dt'\, V_I(t')|m^0\rangle + \dots\right|^2$$

$$V_I = e^{\frac{i}{\hbar}H_0 t}\, V\, e^{-\frac{i}{\hbar}H_0 t} \;\; = \left|\delta_{nm} - \frac{i}{\hbar}\int_0^t dt'\, e^{\frac{i}{\hbar}(E_n^0-E_m^0)t'}\langle n^0|V(t')|m^0\rangle + \dots\right|^2$$

falls $|m^0\rangle \perp |n^0\rangle$: $$\approx \left|\frac{1}{\hbar}\int_0^t dt'\, e^{\frac{i}{\hbar}(E_n^0-E_m^0)t'}\langle n^0|V(t')|m^0\rangle\right|^2 \quad \text{in 1. Ordnung} \qquad (8.21)$$

ζ) Konstante Störung ins Kontinuum

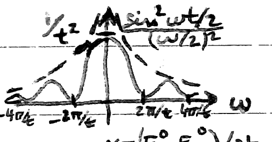
Beispiele (nicht notwendig konstant): Streuung, α-Zerfall, optische Übergänge

$V(t) = V\cdot\Theta(t)$ in 1. Ordnungs-Formel eingesetzt:

$$W_{m\to n}(t) = \frac{1}{\hbar^2}\left|\int_0^t dt'\, e^{\frac{i}{\hbar}(E_n^0-E_m^0)t'}\langle n^0|V|m^0\rangle\right|^2$$

$$= \frac{1}{\hbar^2}\left|\frac{e^{i\omega_{nm}t}-1}{\omega_{nm}}\langle n^0|V|m^0\rangle\right|^2 \quad \text{mit } \omega_{nm} \equiv (E_n^0-E_m^0)/\hbar$$

$$(8.22) \quad = \frac{1}{\hbar^2}\left(\frac{\sin \omega_{nm}t/2}{\omega_{nm}/2}\right)^2 |\langle n^0|V|m^0\rangle|^2$$



$\alpha = (E_n^0-E_m^0)/2\hbar$

für große Zeiten ist $$\frac{\sin^2\alpha t}{\alpha^2} = \pi t\cdot\frac{\sin^2\alpha t}{\pi\alpha^2 t} \to \pi t\cdot\delta(\alpha) = 2\pi\hbar t\,\delta(E_n^0-E_m^0)$$

$$W_{m\to n}(t\text{ groß}) = \frac{2\pi t}{\hbar}\delta(E_n^0-E_m^0)|\langle n^0|V|m^0\rangle|^2 \quad \text{oder}_{(E_n^0=E_m^0)} \quad \frac{t^2}{\hbar^2}|\langle n^0|V|m^0\rangle|^2$$

Energieerhaltung: t endlich $\rightsquigarrow \Delta\omega \sim 4\pi/t$ Unschärfe

Übergangsrate = W. / Zeit:

$$\otimes \quad \Gamma_{m\to n}(t\text{ groß}) = \frac{2\pi}{\hbar}\delta(E_n^0-E_m^0)|\langle n^0|V|m^0\rangle|^2 \quad \text{zeitunabhängig} \qquad (8.23)$$

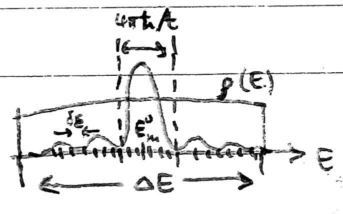
im Kontinuum erreicht man eine Gruppe $[n]$ von Zuständen nahe $|n^0\rangle$,
mit Zustandsdichte $\rho(E_n^0)$ und (nahezu) identischem $\langle *|V|m^0\rangle$:

$$\oplus \quad \Gamma_{m\to[n]} \equiv \sum_n \Gamma_{m\to n} = \int_{\text{um } E_n^0} dE\,\rho(E)\,\Gamma_{m\to n} \approx \rho(E_n^0)\cdot\frac{2\pi}{\hbar}|\langle n^0|V|m^0\rangle|^2 \qquad (8.23')$$

Gleichungen ⊗ oder ⊕ werden als „Fermis Goldene Regel" bezeichnet

Bedingungen für die Gültigkeit:

- Breite der Energieverteilung $\Delta E \gg \frac{2\pi\hbar}{t}$ „Breite" der δ-Funktion
- viele Endzustände innerhalb δ-Funktions-Träger: $\frac{2\pi\hbar}{t} \gg \delta E$



4) Periodische } Harmonische } Störung

$$V(t) = \theta(t)\left(F e^{-i\omega t} + F^\dagger e^{i\omega t}\right)$$

Übergangsmatrixelement in 1. Ordnung (zwischen H_0-Eigenkets!)

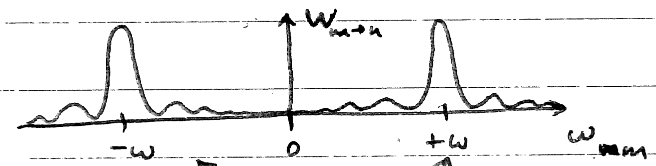
$${}_I\langle n^0(t)|m^0(0)\rangle_I = \langle n^0|U_I(t)|m^0\rangle \qquad [\omega_{nm} \equiv (E_n^0 - E_m^0)/\hbar]$$

$$\overset{|m^0\rangle\perp|n^0\rangle}{=} -\frac{i}{\hbar}\int_0^t dt' \left[e^{i\omega_{nm}t'}\left(e^{-i\omega t'}\langle n^0|F|m^0\rangle + e^{i\omega t'}\langle n^0|F^\dagger|m^0\rangle\right)\right]$$

$$\overset{\text{wie (*), nur } \omega_{nm}\to\omega_{nm}\pm\omega}{=} -\frac{i}{\hbar}\left[\frac{\sin(\omega_{nm}-\omega)\frac{t}{2}}{(\omega_{nm}-\omega)/2}\langle n^0|F|m^0\rangle + \frac{\sin(\omega_{nm}+\omega)\frac{t}{2}}{(\omega_{nm}+\omega)/2}\langle n^0|F^\dagger|m^0\rangle\right]$$

$$W_{m\to n}(t\text{ groß}) \overset{\text{siehe (*)}}{=} \frac{2\pi}{\hbar}t\left[\delta(E_n^0-E_m^0-\hbar\omega)|\langle n^0|F|m^0\rangle|^2 + \delta(E_n^0-E_m^0+\hbar\omega)|\langle n^0|F^\dagger|m^0\rangle|^2\right] \qquad (8.24)$$

Mischterme in $|..|^2$ sind vernachlässigbar klein, wenn $\omega \gg 4\pi/t$



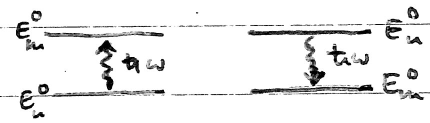
nur einer der Fälle realisiert!

Übergangsrate ins Kontinuum:

$$\Gamma_{m\to[n]} \approx \frac{2\pi}{\hbar}\rho(E_n^0)\,|\langle n^0|V|m^0\rangle|^2$$ (Erweiterung der „Goldenen Regel")

wobei $\begin{cases} V=F \text{ und } E_n^0 = E_m^0+\hbar\omega & \text{„Absorption"} \\ V=F^\dagger \text{ und } E_n^0 = E_m^0-\hbar\omega & \text{„stimulierte Emission"} \end{cases}$ (8.24')

Energie des gestörten Systems ist nicht erhalten!



aus $\langle n^0|F^\dagger|m^0\rangle = \langle m^0|F|n^0\rangle^*$ folgt

$$\frac{\Gamma^{\text{emission}}_{m\to[n]}}{\rho(E_n^0)} = \frac{\Gamma^{\text{absorption}}_{n\to[m]}}{\rho(E_m^0)}$$ „detailed balance" $\rightleftarrows$

für WW mit e.m. Strahlungsfeld:

$$V(t) = -\frac{e}{2mc}\left[\vec{P}\cdot\vec{A}(\vec{R},t) + \vec{A}(\vec{R},t)\cdot\vec{P}\right] + \frac{e^2}{2mc^2}\vec{A}^2(\vec{R},t) + e\,\Phi(\vec{R},t)$$

zunächst sind $\vec{A}(\vec{R},t)$ & $\Phi(\vec{R},t)$ vorgegebene Elem. des Ortsoperators $\vec{R}$ (→ klass. e.m. Feld, extern)

→ QED
→ Lamb-Shift
→ Spont. Em.

Später werden $\vec{A}, \Phi$ Operatoren des quantisierten Strahlungsfeldes, die auf ihren eigenen Hilbertraum wirken (Photon-Zustände!). Orts-Argument dann nur noch Zahl $\vec{r}$, $\int d^3r$ gegen Teilchenstrom $\begin{cases}\rho(\vec{r})\\ \vec{j}(\vec{r})\end{cases}$ [illegible]

9) exakt lösbares Paradebeispiel: 2-Niveau-System mit period. Störung

$$H = \begin{pmatrix} E_1 & \gamma e^{i\omega t} \\ \gamma e^{-i\omega t} & E_2 \end{pmatrix} \qquad E_2 > E_1 \qquad (E_i \equiv E_i^0)$$

verbindet 2 Eigenzustände $|1\rangle \Longleftrightarrow |2\rangle$ von H_0 → Übergänge!

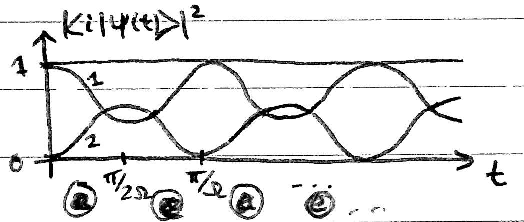
exakte Lösung („Rabis Formel"):

$$W_{1\to 2}(t) = \frac{\gamma^2}{\hbar^2\Omega^2}\sin^2 \Omega t \qquad \text{mit } (\hbar\Omega)^2 = \gamma^2 + (E_2-E_1-\hbar\omega)^2/4$$

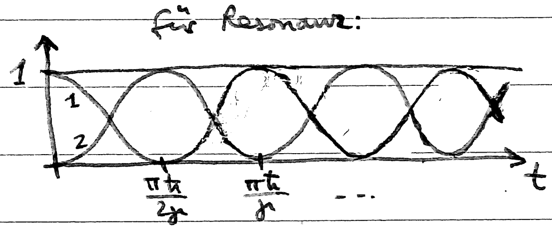
$$W_{1\to 1}(t) = 1 - W_{1\to 2}(t)$$

(8.25)

beginne mit $|\psi(0)\rangle = |1\rangle$, dann oszillieren die Populationen $|\langle i|\psi(t)\rangle|^2$



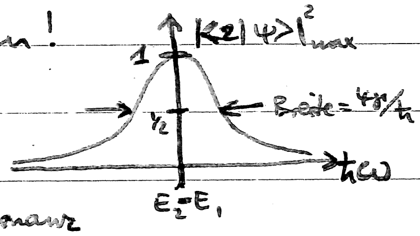
für Resonanz:



→ alternierende Emissions-/Absorptions-Zyklen!

→ Resonanz für $E_2 - E_1 = \hbar\omega \Longleftrightarrow \Omega = \gamma/\hbar$

→ je schwächer (γ) die Störung, desto schärfer die Resonanz



Anwendungen:

magnet. Spin-Resonanz ($\equiv$NMR), Maser, Laser, ...

Herleitung von Rabis Formel:

Dgl.: $i\hbar\partial_t|\psi_I(t)\rangle = V_I(t)|\psi_I(t)\rangle$, $\quad V_I = U_0^\dagger V U_0 = e^{\frac{i}{\hbar}H_0 t}\, V\, e^{-\frac{i}{\hbar}H_0 t}$

hier: $V = \gamma\begin{pmatrix} 0 & e^{i\omega t} \\ e^{-i\omega t} & 0\end{pmatrix} = \gamma(\sigma_1 \cos\omega t - \sigma_2 \sin\omega t) \to V_I = \gamma\begin{pmatrix} 0 & e^{-\frac{i}{\hbar}\alpha t} \\ e^{\frac{i}{\hbar}\alpha t} & 0\end{pmatrix}$ mit $\alpha \equiv E_2 - E_1 - \hbar\omega$

schreibe: $|\psi_I(t)\rangle = c_1(t)|1\rangle + c_2(t)|2\rangle = \begin{pmatrix} c_1(t) \\ c_2(t)\end{pmatrix}$ mit $c_1(0) = 1$, $c_2(0) = 0$

$$\to \begin{cases} i\hbar\dot c_1 = \gamma e^{-\frac{i}{\hbar}\alpha t} c_2 \\ i\hbar \dot c_2 = \gamma e^{\frac{i}{\hbar}\alpha t} c_1 \end{cases} \to \begin{cases} -\hbar^2 \ddot c_1 = \gamma\alpha e^{-\frac{i}{\hbar}\alpha t} c_2 + \gamma^2 c_1 = i\hbar\alpha\dot c_1 + \gamma^2 c_1 \\ -\hbar^2\ddot c_2 = -\gamma\alpha e^{\frac{i}{\hbar}\alpha t} c_1 + \gamma^2 c_2 = -i\hbar\alpha \dot c_2 + \gamma^2 c_2 \end{cases} \otimes$$

knapp

Ansatz: $\begin{cases} c_1 = e^{i\lambda_1 t} \overset{\otimes}{\to} \hbar^2\lambda_1^2 + \alpha\hbar\lambda_1 - \gamma^2 = 0 \to \hbar\lambda_{1\pm} = -\frac{\alpha}{2} \pm \hbar\Omega \\ c_2 = e^{i\lambda_2 t} \overset{\otimes}{\to} \hbar^2\lambda_2^2 - \alpha\hbar\lambda_2 - \gamma^2 = 0 \to \hbar\lambda_{2\pm} = +\frac{\alpha}{2} \pm \hbar\Omega \end{cases}$ mit $\hbar\Omega \equiv \sqrt{\alpha^2/4 + \gamma^2}$ und $\hbar\lambda_{2\pm} = \alpha + \hbar\lambda_{1\pm}$

Also: $\begin{cases} c_1(t) = A_1 e^{i\lambda_{1+}t} + (1-A_1)e^{i\lambda_{1-}t} \\ c_2(t) = A_2 e^{i\lambda_{2+}t} - A_2 e^{i\lambda_{2-}t} \end{cases} \to i\hbar\dot c_2 = A_2\hbar\left(-\lambda_{2+}e^{i\lambda_{1+}t} + \lambda_{2-}e^{i\lambda_{1-}t}\right)e^{\frac{i}{\hbar}\alpha t}$

$\overset{!}{=} \gamma e^{\frac{i}{\hbar}\alpha t}\left(A_1 e^{i\lambda_{1+}t} + (1-A_1)e^{i\lambda_{1-}t}\right)$

$W_{1\to 2} = |c_2|^2$

$\to 1 = A_1 + (1-A_1) = \frac{A_2\hbar}{\gamma}(-\lambda_{2+} + \lambda_{2-}) = -\frac{A_2\hbar}{\gamma}2\Omega \to A_2 = -\frac{\gamma}{2\hbar\Omega} \to c_2(t) = \frac{\gamma}{i\hbar\Omega}e^{\frac{i}{\hbar}\alpha t}\sin\Omega t$ ✓