1. Zeitabhängige Störungstheorie

1.1 Grundlagen [Sakurai 2.1-3]

Es gibt (mindestens) zwei unterschiedliche Fälle, die eine nichttriviale Zeitabhängigkeit aufweisen:

(i) Hamilton-Operator sei zeitunabhängig: $\hat{H} = \frac{\hat{\vec{p}}^2}{2m} + V(\hat{\vec{r}})$.

Zeitentwicklung von Energie-Eigenzuständen:

$$i\hbar\partial_t |n(t)\rangle = \hat{H}|n(t)\rangle = E_n |n(t)\rangle$$

$$\Rightarrow |n(t)\rangle = e^{-\frac{iE_nt}{\hbar}} |n(0)\rangle$$

$$\text{Übergangsamplitude} = C_{mn}(t) :\overset{!}{=} \langle m(0)|n(t)\rangle = e^{-\frac{iE_nt}{\hbar}} \langle m(0)|n(0)\rangle = e^{-\frac{iE_nt}{\hbar}} \delta_{mn}$$

QT I bzw. MMP I: Eigenzustände mit unterschiedlichen Eigenwerten sind orthogonal aufeinander.

$\Rightarrow$ Übergangswahrscheinlichkeit $= P_{mn} := |C_{mn}|^2 = \delta_{mn}$.

Wenn wir aber einen Eigenzustand eines Operators betrachten, der mit $\hat{H}$ <u>nicht</u> vertauscht, z.B. $\hat{\vec{p}}$ (falls $V(\hat{\vec{r}}) \neq \hat{0}$), dann ist die Zeitentwicklung <u>nichttrivial</u>!

$\Rightarrow$ Übungsaufgaben.

Zur Erinnerung: $[\hat{r}_j, \hat{p}_k] = i\hbar\,\delta_{jk}$

$$\Rightarrow [\hat{\vec{r}}^2, \hat{p}_k] = \sum_j [\hat{r}_j\hat{r}_j, \hat{p}_k]$$
$$= \sum_j \left\{ \hat{r}_j\hat{r}_j\hat{p}_k - \hat{p}_k\hat{r}_j\hat{r}_j - \hat{r}_j\hat{p}_k\hat{r}_j + \hat{r}_j\hat{p}_k\hat{r}_j \right\}$$
$$= \sum_j \left\{ \hat{r}_j[\hat{r}_j, \hat{p}_k] + [\hat{r}_j, \hat{p}_k]\hat{r}_j \right\} = 2i\hbar\hat{r}_k$$

usw.

(ii) Wenn der Hamilton-Operator selbst zeitabhängig ist, haben sogar seine Eigenzustände eine nichttriviale Zeitabhängigkeit. Häufig:

$$\hat{H}(t) = \underbrace{\hat{H}_0}_{\text{zeitunabhängig}} + \underbrace{\hat{V}(t)}_{\text{„klein"}}.$$

Zwei Möglichkeiten:

* $[\hat{H}(t), \hat{H}(t')] = 0$, z.B. $\hat{H}(t) := \frac{eB_z(t)}{mc}\hat{S}_z$ (Magnetfeld in z-Richtung; Spin in z-Richtung)

* $[\hat{H}(t), \hat{H}(t')] \neq 0$, z.B. $\hat{H}(t) := \frac{eB}{mc}\left\{\cos(\omega t)\hat{S}_x + \sin(\omega t)\hat{S}_y\right\}$

rotierendes Magnetfeld

$[\hat{S}_k, \hat{S}_\ell] = \sum_m i\hbar\epsilon_{jkm}\hat{S}_m$

Allgemeine Zeitentwicklung im „Schrödinger-Bild"

Sei $|\Psi(t)\rangle$ eine Lösung der zeitabhängigen Schrödinger-Gleichung

$$i\hbar\,\partial_t |\Psi(t)\rangle = \hat{H}(t)\,|\Psi(t)\rangle \,.$$

Wir schreiben

$$|\Psi(t)\rangle =: \hat{U}(t;t_0)\,|\Psi(t_0)\rangle$$

wobei $\hat{U}(t;t_0)$ der Zeitentwicklungsoperator heisst, und $|\Psi(t_0)\rangle$ eine (im Prinzip) bekannte Anfangsbedingung bezeichnet. Es folgt:

$$\left\{\begin{aligned} i\hbar\,\partial_t \hat{U}(t;t_0) &= \hat{H}(t)\,\hat{U}(t;t_0) \\ \hat{U}(t_0;t_0) &= \mathbb{1} \end{aligned}\right\} \text{ unabhängig von } |\Psi(t_0)\rangle\,!$$

QTI : $\hat{H}$ hermitesch (d.h. $\hat{H}^\dagger = \hat{H}$) $\Rightarrow$ $\hat{U}$ unitär (d.h. $\hat{U}^\dagger\hat{U} = \mathbb{1}$).

Behauptung:

$$\hat{U}(t;t_0) = \mathbb{1} + \frac{1}{i\hbar}\int_{t_0}^{t} dt_1\,\hat{H}(t_1) + \frac{1}{(i\hbar)^2}\int_{t_0}^{t} dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2\, \underbrace{\hat{H}(t_1)\hat{H}(t_2)}_{\text{„zeitgeordnet", d.h. spätere Zeiten links (auch: „Dyson-Reihe")}} + \ldots$$

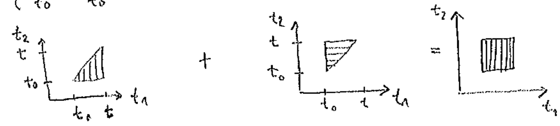
Beweis:

$$\hat{U}(t_0;t_0) = \mathbb{1} \quad \text{ok!}$$

$$\begin{aligned} i\hbar\,\partial_t \hat{U}(t;t_0) &= 0 + \hat{H}(t) + \frac{1}{i\hbar}\int_{t_0}^{t} dt_1\, \hat{H}(t)\hat{H}(t_1) + \ldots \\ &= \hat{H}(t)\left[\mathbb{1} + \frac{1}{i\hbar}\int_{t_0}^{t} dt_1\,\hat{H}(t_1) + \ldots\right] \quad \blacksquare \end{aligned}$$

Folge 1: $[\hat{H}(t), \hat{H}(t')] = 0$

$$\Rightarrow \int_{t_0}^{t} dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2\, \hat{H}(t_1)\hat{H}(t_2) = \frac{1}{2}\left\{ \int_{t_0}^{t} dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2\, \hat{H}(t_1)\hat{H}(t_2) + \int_{t_0}^{t} dt_2 \int_{t_0}^{t_2} dt_1\, \hat{H}(t_2)\hat{H}(t_1) \right\}$$



$$= \frac{1}{2}\int_{t_0}^{t} dt_1 \int_{t_0}^{t} dt_2\, \hat{H}(t_1)\hat{H}(t_2) = \frac{1}{2}\left\{\int_{t_0}^{t} dt_1\,\hat{H}(t_1)\right\}^2$$

usw

$$\Rightarrow \hat{U}(t;t_0) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!}\left(\frac{1}{i\hbar}\int_{t_0}^{t} dt_1\,\hat{H}(t_1)\right)^n =: \exp\left(\frac{1}{i\hbar}\int_{t_0}^{t} dt_1\,\hat{H}(t_1)\right).$$

Folge 2: $\hat{H}(t)$ zeitunabhängig

$$\Rightarrow \hat{U}(t;t_0) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar}(t-t_0)\,\hat{H}\right).$$

Beispiel: $\hat{H} = \frac{\hat{\vec{p}}^2}{2m} + V(\hat{\vec{r}})$ $\Rightarrow$

$$|\vec{p}(t)\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar}(t-t_0)\hat{H}}\; \underbrace{|\vec{p}(t_0)\rangle}_{} \qquad \mathbb{1} = \sum_n |n(t_0)\rangle\langle n(t_0)|$$

$$= \sum_n e^{-\frac{i}{\hbar}(t-t_0)E_n} \langle n(t_0)|\vec{p}(t_0)\rangle\; |n(t_0)\rangle$$

Zeitabhängigkeit als Phasenfaktoren

Übergangsamplituden im Anfangszustand

Energie-Eigenzustände bei $t = t_0$

Allgemeine Zeitentwicklung im „Heisenberg-Bild"

Physik liegt in Erwartungswerten:

$$\langle \psi(t) | \hat{A} | \psi(t) \rangle = \langle \psi(0) | \hat{U}^{+}(t;0)\, \hat{A}\, \hat{U}(t;0) | \psi(0) \rangle = \langle \psi_H | \hat{A}_H(t) | \psi_H \rangle ,$$

wobei $\left\{ \begin{array}{ll} |\psi_H\rangle := |\psi(0)\rangle & \text{einen zeitunabhängigen Zustand} \\ \hat{A}_H(t) := \hat{U}^{+}(t;0)\hat{A}\hat{U}(t;0) & \text{einen zeitabhängigen Operator} \end{array} \right\}$ des Heisenberg-Bilds bezeichnen.

Bewegungsgleichung im Heisenberg-Bild:

$$i\hbar \partial_t \hat{A}_H(t) = -\hat{U}^{+}(t;0)\, \hat{H}\hat{A}\, \hat{U}(t;0) + \hat{U}^{+}(t;0)\, \hat{A}\hat{H}\, \hat{U}(t;0)$$

$\boxed{\mathbb{1} = \hat{U}(t;0)\hat{U}^{+}(t;0)}$ $\qquad$ $\boxed{\mathbb{1} = \hat{U}(t;0)\hat{U}^{+}(t;0)}$

$$= -\hat{H}_H(t)\,\hat{A}_H(t) + \hat{A}_H(t)\,\hat{H}_H(t)$$

$$= \left[\hat{A}_H(t), \hat{H}_H(t) \right] . \qquad (*)$$

Bemerkung: Falls $[\hat{H}(t), \hat{H}(t')] = 0$ gilt, dann ist $\hat{U}(t;0) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\int_0^t dt_1 \hat{H}(t_1)\right)$ (Seite 4)

und folglich

$$\hat{H}_H(t) = e^{\frac{i}{\hbar}\int_0^t dt_1 \hat{H}(t_1)}\, \hat{H}\, e^{-\frac{i}{\hbar}\int_0^t dt_1 \hat{H}(t_1)} = \hat{H}\hat{U}^{+}\hat{U} = \hat{H} ,$$

d.h. $i\hbar\partial_t \hat{A}_H = [\hat{A}_H, \hat{H}]$.

Behauptung: Die Lösung von $(*)$ lautet

$$\hat{A}_H(t) = \hat{A} + \frac{1}{i\hbar}\int_0^t dt_1 \left[\hat{A}, \hat{H}_H(t_1)\right] + \frac{1}{(i\hbar)^2}\int_0^t dt_1 \int_0^{t_1} dt_2 \left[\left[\hat{A}, \hat{H}_H(t_2)\right], \hat{H}_H(t_1)\right] + \dots$$

Beweis:

$$\hat{A}_H(0) = \hat{A} \qquad \text{ok!}$$

$$i\hbar\partial_t \hat{A}_H(t) = 0 + \left[\hat{A}, \hat{H}_H(t)\right] + \frac{1}{i\hbar}\int_0^t dt_1 \left[\left[\hat{A}, \hat{H}_H(t_1)\right], \hat{H}_H(t)\right] + \dots$$

$$= \left[\hat{A} + \frac{1}{i\hbar}\int_0^t dt_1 \left[\hat{A}, \hat{H}_H(t_1)\right] + \dots ,\ \hat{H}_H(t)\right]$$

$$= \left[\hat{A}_H(t), \hat{H}_H(t)\right] \qquad \blacksquare .$$

Bemerkung: Falls wir den Spezialfall $\hat{H}(t) \to \hat{H}$ betrachten, haben wir gerade die „Campbell-Baker-Hausdorff-Formel" verifiziert:

$$\hat{A}_H(t) = e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}\, \hat{A}\, e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}$$

Seite 4

$$= \hat{A} + \frac{t}{i\hbar}\left[\hat{A}, \hat{H}\right] + \frac{1}{2}\left(\frac{t}{i\hbar}\right)^2 \left[\left[\hat{A}, \hat{H}\right], \hat{H}\right] + \dots$$

Behauptung oben zusammen mit $\int_0^t dt_1 \int_0^{t_1} dt_2 = \frac{1}{2}t^2$ usw

$$= \hat{A} + \frac{it}{\hbar}\left[\hat{H}, \hat{A}\right] + \frac{1}{2}\left(\frac{it}{\hbar}\right)^2 \left[\hat{H}, \left[\hat{H}, \hat{A}\right]\right] + \dots .$$

umordne alle Vertauschungen

Allgemeine Zeitentwicklung im „Dirac-Bild" bzw. „Wechselwirkungsbild"

Das Dirac-Bild ist für den Fall geeignet, dass der Hamilton-Operator der Form

$$\hat{H}(t) = \hat{H}_0 + \hat{V}(t)$$

ist. Die Grundidee besteht darin, dass wir bzgl. $\hat{H}_0$ wie im Heisenberg-Bild vorgehen. Dieser Formalismus kommt insbesondere in der zeitabhängigen Störungstheorie zum Tragen, weil die Zustände „nur langsam", d.h. proportional zu $\hat{V}$, sich zeitlich entwickeln.

Definitionen:

$$|\Psi_I(t)\rangle := e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}_0 t}\,|\Psi(t)\rangle$$

$$\hat{A}_I(t) := e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}_0 t}\,\hat{A}\,e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}_0 t}$$

$$\leadsto \quad \langle\Psi_I(t)|\,\hat{A}_I(t)\,|\Psi_I(t)\rangle = \langle\Psi(t)|\,\hat{A}\,|\Psi(t)\rangle \quad \text{ok.}$$

Bewegungsgleichungen:

$$
\begin{aligned}
i\hbar\,\partial_t\,|\Psi_I(t)\rangle &= e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}_0 t}\left[-\hat{H}_0 + \hat{H}(t)\right]|\Psi(t)\rangle \\
&= e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}_0 t}\,\hat{V}(t)\,e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}_0 t}\,e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}_0 t}\,|\Psi(t)\rangle \\
&= \hat{V}_I(t)\,|\Psi_I(t)\rangle \\
i\hbar\,\partial_t\,\hat{A}_I(t) &= e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}_0 t}\left(-\hat{H}_0\hat{A} + \hat{A}\hat{H}_0\right)e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}_0 t} \qquad \mathbb{1} = e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}_0 t}\,e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}_0 t} \\
&= \left[\hat{A}_I(t), \hat{H}_0\right].
\end{aligned}
$$

Zeitentwicklungsoperator:

$$|\Psi_I(t)\rangle =: \hat{U}_I(t;t_0)\,|\Psi_I(t_0)\rangle$$

„langsame Variation"

$$\leadsto \begin{cases} i\hbar\,\partial_t\,\hat{U}_I(t;t_0) = \hat{V}_I(t)\,\hat{U}_I(t;t_0) \\ \hat{U}_I(t_0;t_0) = \mathbb{1}. \end{cases}$$

Lösung (Dyson-Reihe): Alles läuft wie im Schrödinger-Bild auf Seite 4 mit dem Ersatz $\hat{H}(t) \to \hat{V}_I(t)$, d.h.

$$\boxed{\hat{U}_I(t;t_0) = \mathbb{1} - \frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t} dt_1\,\hat{V}_I(t_1) + \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^2 \int_{t_0}^{t} dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2\,\hat{V}_I(t_1)\,\hat{V}_I(t_2) + \ldots}$$

Diese Formel dient als Ausgangspunkt für Kapitel 1.2.

— · —