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:

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

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

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

QM I bzw. Lineare Algebra: Eigenzustände mit unterschiedlichen Eigenwerten sind orthogonal aufeinander.

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

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

$\Rightarrow$ Aufgaben 1.1-3.

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

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

usw.)

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

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

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. $\hat{H}(t) := \frac{eB}{mc}\{\cos(\omega t)\hat{S}_x + \sin(\omega t)\hat{S}_y\}$

rotierendes Magnetfeld

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

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 <u>Zeitentwicklungsoperator</u> heißt, und $|\Psi(t_0)\rangle$ eine (im Prinzip) bekannte Anfangsbedingung bezeichnet. Es folgt:

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

QM I: $\quad \hat{H}$ hermitesch (d.h. $\hat{H}^{+}=\hat{H}$) $\Rightarrow$ $\hat{U}$ unitär (d.h. $\hat{U}^{+}\hat{U}=\mathbb{1}$).

<u>Behauptung</u>:

$$\hat{U}(t;t_0) = \mathbb{1} + \frac{1}{i\hbar}\int_{t_0}^{t} dt_1\,\hat{H}(t_1) + \frac{1}{(i\hbar)^2}\int_{t_0}^{t} dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2\, \underbrace{\hat{H}(t_1)\,\hat{H}(t_2)} + \ldots$$

„zeitgeordnet", d.h. spätere Zeiten links (auch: „Dyson-Reihe")

<u>Beweis</u>:

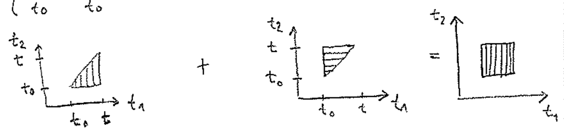
$$\hat{U}(t_0;t_0) = \mathbb{1} \qquad \text{ok!}$$

$$\begin{aligned} i\hbar\,\partial_t\,\hat{U}(t;t_0) &= 0 + \hat{H}(t) + \frac{1}{i\hbar}\int_{t_0}^{t} dt_{\cancel{2}1}\,\hat{H}(t)\,\hat{H}(t_{\cancel{2}1}) + \ldots \\ &= \hat{H}(t)\left[\mathbb{1} + \frac{1}{i\hbar}\int_{t_0}^{t} dt_1\,\hat{H}(t_1) + \ldots\right] \end{aligned} \qquad \blacksquare$$

<u>Folge 1</u>:

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

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



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

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

<u>Folge 2</u>: $\quad \hat{H}(t)$ zeitunabhängig

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

<u>Beispiel</u>:

$$\hat{H} = \frac{\hat{\vec{p}}^{\,2}}{2m} + V(\hat{\vec{r}}) \quad \Rightarrow \quad |\vec{p}(t)\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar}(t-t_0)\hat{H}}\;\underset{\mathbb{1} = \sum_n |n(t_0)\rangle\langle n(t_0)|}{|\vec{p}(t_0)\rangle}$$

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

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 $\left\{ \begin{array}{ll} |\Psi_H\rangle := |\Psi(0)\rangle & \text{ein zeit}\underline{\text{un}}\text{abhängiger Zustand} \\ \hat{A}_H(t) := \hat{U}^+(t;0)\hat{A}\hat{U}(t;0) & \text{ein zeitabhängiger Operator} \end{array} \right\}$ des Heisenberg-Bildes bezeichnen.

Bewegungsgleichung im Heisenberg-Bild:

$$i\hbar \partial_t \hat{A}_H(t) = -\hat{U}^+(t;0) \underset{\uparrow \; \mathbb{1} = \hat{U}(t;0)\hat{U}^+(t;0)}{\hat{H}\hat{A}} \hat{U}(t;0) + \hat{U}^+(t;0) \underset{\uparrow \; \mathbb{1} = \hat{U}(t;0)\hat{U}^+(t;0)}{\hat{A}\hat{H}} \hat{U}(t;0)$$

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

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

<u>Bemerkung:</u> 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. $i\hbar \partial_t \hat{A}_H = [\hat{A}_H, \hat{H}]$.

<u>Behauptung:</u> Die Lösung von $(*)$ lautet

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

<u>Beweis:</u>

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

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

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

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

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

$$\hat{A}_H(t) \underset{\text{Seite 4}}{=} e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}t} \hat{A} e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}$$

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

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

umordne alle Vertauschungen

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

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:

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

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

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

Bewegungsgleichungen:

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

$$i\hbar\partial_t\hat{A}_I(t) = e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}_0 t}\left(-\hat{H}_0\hat{A} + \hat{A}\hat{H}_0\right)e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}_0 t} \qquad \mathbb{1} = e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}_0 t}\,e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}_0 t}$$

$$= \left[\hat{A}_I(t), \hat{H}_0\right].$$

Zeitentwicklungsoperator:

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

„langsame Variation"

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

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.

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

Diese Formel dient als Ausgangspunkt für Kapitel 1.2.

— · —