Quantenmechanik II
FSU Jena - WS 2009/2010
Übungsserie 11 - Lösungen

Stilianos Louca

14. Februar 2010

Aufgabe 19

Erinnerung

Gegeben sei der zeitunabhängige Hamiltonian $\hat{H}^0$, dazu der Eigenwert E^0 mit zugehöriger Orthonormalbasis $\{|E^0 j\rangle\}_{j=1}^g$ des Eigenraumes $\mathcal{H}_{E^0}$. Sei $\lambda\hat{W}$ eine zeitunabhängige Störung des Hamiltonians mit skalierungsparameter $\lambda \in \mathbb{R}$. Zu bestimmen sind die Eigenvektoren $|\psi(\lambda)\rangle$ des Hamiltonians

$$\hat{H}(\lambda) := \hat{H}^0 + \lambda\hat{W}$$

zu Energien $E(\lambda)$ für die $E(\lambda) \xrightarrow{\lambda\to 0} E^0$. Machen dazu den Ansatz

$$|\psi(\lambda)\rangle = \underbrace{\sum_{j=1}^g C_j \cdot |E^0 j\rangle}_{|\psi^0\rangle \in \mathcal{H}_{E^0}} + \lambda\,|\psi^1\rangle + \mathcal{O}(\lambda^2) \tag{0.1}$$

und

$$E(\lambda) = E^0 + \lambda E^1 + \mathcal{O}(\lambda^2) \tag{0.2}$$

mit den zu bestimmenden Faktoren $C_j \in \mathbb{C}$ und Korrekturen $E^1 \in \mathbb{R}$ & $|\psi^1\rangle$. Dabei setzen wir o.B.d.A.

$$|\psi^1\rangle \perp \mathcal{H}_{E^0} \tag{0.3}$$

voraus. Durch die Forderung $\hat{H}\,|\psi\rangle \overset{!}{=} E\,|\psi\rangle$ erhält man aus (0.1) & (0.2)

$$\cancel{H^0\,|\psi^0\rangle} + \lambda\hat{H}^0\,|\psi^1\rangle + \lambda\hat{W}\,|\psi^0\rangle + \mathcal{O}(\lambda^2) = \hat{H}\,|\psi\rangle \overset{!}{=} E\,|\psi\rangle = \cancel{E^0\,|\psi^0\rangle} + \lambda E^0\,|\psi^1\rangle + \lambda E^1\,|\psi^0\rangle + \mathcal{O}(\lambda^2)$$

und durch Ordnungsvergleich

$$(\hat{W} - E^1)\,|\psi^0\rangle + (\hat{H}^0 - E^0)\,|\psi^1\rangle = 0 \tag{0.4}$$

Skalarmultiplikation von (0.4) mit $|E^0 k\rangle$ und Beachtung von (0.3) liefert das lineare, homogene Gleichungssystem

$$\sum_{j=1}^g C_j \cdot \left[\langle E^0 k|\,\hat{W}\,|E^0 j\rangle - E^1\delta_{jk}\right] = 0 \quad \forall\ k = 1,..,g \tag{0.5}$$

in den unbekannten C_j, parametrisiert durch E^1. Dies entspricht genau einem Eigenwertproblem für die $g\times g$ Matrix

$$M := \left(\langle E^0 k|\,\hat{W}\,|E^0 j\rangle\right)_{j,k=1}^g \in \mathbb{C}^{g\times g}$$

in den Eigenwerten $E^1 \in \mathbb{C}$ und Eigenvektoren $\mathbf{C} := (C_1,..,C_g) \in \mathbb{C}^g$. Insbesondere muss

$$\det\left(M - E^1 \cdot \mathrm{Id}_{g\times g}\right) \overset{!}{=} 0 \tag{0.6}$$

Beachte dass $\hat{W}$ und daher auch M hermitesch sind, letztere also tatsächlich g orthonormale Eigenvektoren $\mathbf{C}^{(1)}, .., \mathbf{C}^{(g)}$ besitzt. Diese entsprechend dann mit (0.1) den neuen Eigenzuständen von $\hat{H}$ in 0. Ordnung (*richtige Linearkombinationen*). Die zugehörigen (nicht unbedingt verschiedenen) Eigenwerte $E^{1^{(1)}}, .., E^{1^{(g)}}$ entsprechen mit (0.2) den Energiekorrekturfaktoren 1. Ordnung.

Energieniveaus für den Spezialfall $g = 2$

Es bezeichne E^1 die Energiekorrektur 1. Ordnung[1] des Eigenzustandes

$$|\varphi\rangle = \sum_{j=1}^{2} C_j \left|\varphi_j^0\right\rangle + \mathcal{O}\left(\|\hat{W}\|\right) \tag{0.7}$$

des gestörten Hamiltonians

$$\hat{H} := \hat{H}^0 + \hat{W}$$

bzgl. der Eigenenergie E^0 von $\hat{H}^0$. Mit

$$M := \begin{pmatrix} \left\langle\varphi_1^0\right| \hat{W} \left|\varphi_1^0\right\rangle & \left\langle\varphi_2^0\right| \hat{W} \left|\varphi_1^0\right\rangle \\ \left\langle\varphi_1^0\right| \hat{W} \left|\varphi_2^0\right\rangle & \left\langle\varphi_2^0\right| \hat{W} \left|\varphi_2^0\right\rangle \end{pmatrix} =: \begin{pmatrix} W_{11} & W_{12} \\ W_{21} & W_{22} \end{pmatrix}$$

nimmt (0.6) die Form

$$0 = (E^1)^2 - E^1 \cdot \mathrm{trace}(M) + \det(M) \tag{0.8}$$

an, so dass M die Eigenwerte

$$E^{1^{(1),(2)}} = \frac{1}{2}\left[\mathrm{trace}(M) \pm \sqrt{\mathrm{trace}^2(M) - 4\det(M)}\right] = \frac{1}{2}\left[(W_{11} + W_{22}) \pm \sqrt{(W_{11} - W_{22})^2 + 4\left|W_{12}\right|^2}\right] \tag{0.9}$$

besitzt.

Interpretation: Das Energieniveau E^0 verschiebt sich und spaltet sich zugleich in zwei Unterniveaus mit dem Abstand

$$\boxed{\Delta E := E^{1^{(1)}} - E^{1^{(2)}} = \sqrt{(W_{11} - W_{22})^2 + 4\left|W_{12}\right|^2}} \tag{0.10}$$

auf (vgl. Abb. (0.1)).

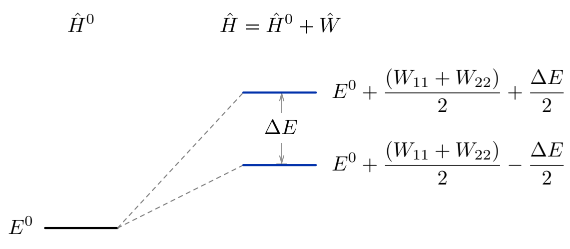

Abbildung 0.1: Zur Aufgabe 19: Schematische Darstellung der Aufspaltung des 2-fach entarteten Energieniveaus E^0 in zwei neue, durch Wirkung der Störung $\hat{W}$.

[1]Sprich $E = E^0 + E^1 + \mathcal{O}\left(\|\hat{W}\|^2\right)$.

Zustände für den Spezialfall $g = 2$

Die Forfaktoren C_j aus (0.7) (und damit die *richtigen Linearkombinationen*) ergeben sich analog zu (0.5) als Lösung des linearen Gleichungssystems

$$(M - E^1\,\mathrm{Id}) \cdot \mathbf{C} \stackrel{!}{=} 0$$

gemäß

$$\mathbf{C}^{(1)} = \frac{1}{N^{(1)}} \begin{pmatrix} 2W_{12} \\ \\ W_{22} - W_{11} + \Delta E \end{pmatrix} \quad , \quad \mathbf{C}^{(2)} = \frac{1}{N^{(2)}} \begin{pmatrix} 2W_{12} \\ \\ W_{22} - W_{11} - \Delta E \end{pmatrix}$$

mit den Normierungskonstanten

$$N^{(1)} := \sqrt{2\Delta E(\Delta E + (W_{22} - W_{11}))} \quad , \quad N^{(2)} := \sqrt{2\Delta E(\Delta E - (W_{22} - W_{11}))}$$

Die beiden durch die Aufspaltung von E^0 entstandenen Eigenzustände von $\hat{H}$ lauten also in 0. Ordnung

$$\left|\varphi^{(1)}\right\rangle = \frac{2W_{12}}{N^{(1)}} \left|\varphi_1^0\right\rangle + \frac{1}{N^{(1)}} (W_{22} - W_{11} + \Delta E) \cdot \left|\varphi_2^0\right\rangle + \mathcal{O}\big(\|\hat{W}\|\big)$$

$$\left|\varphi^{(2)}\right\rangle = \frac{2W_{12}}{N^{(2)}} \left|\varphi_1^0\right\rangle + \frac{1}{N^{(2)}} (W_{22} - W_{11} - \Delta E) \cdot \left|\varphi_2^0\right\rangle + \mathcal{O}\big(\|\hat{W}\|\big)$$

Aufgabe 20

Zeitunabhängige Störungsrechnung

Entwickeln

$$\left|\varphi_1^0\right\rangle = \underbrace{N^{(1)} \cdot \frac{(W_{11} - W_{22} + \Delta E)}{4W_{12}\Delta E}}_{\alpha} \cdot \left|\varphi^{(1)}\right\rangle + \underbrace{N^{(2)} \cdot \frac{(W_{22} - W_{11} + \Delta E)}{4W_{12}\Delta E}}_{\beta} \left|\varphi^{(2)}\right\rangle + \mathcal{O}\big(\|\hat{W}\|\big) \tag{0.11}$$

$$\left|\varphi_2^0\right\rangle = \frac{1}{2\Delta E} \left[N^{(1)} \cdot \left|\varphi^{(1)}\right\rangle - N^{(2)} \cdot \left|\varphi^{(2)}\right\rangle\right] + \mathcal{O}\big(\|\hat{W}\|\big) \tag{0.12}$$

Der Propagationsoperator $\hat{U}$ des zeitunabhängigen Hamiltonians $\hat{H}$ ist gegeben durch

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

wobei per Konstruktion

$$\hat{U}(t, t_0) \left|\varphi^{(j)}\right\rangle = \exp\left[\frac{E^{(j)}}{i\hbar}(t - t_0)\right] \left|\varphi^{(j)}\right\rangle \tag{0.13}$$

mit

$$E^{(j)} = E^0 + E^{1\,(j)} + \mathcal{O}(\|\hat{W}\|^2) \tag{0.14}$$

als $\hat{H}$-Energieeigenwert von $\left|\varphi^{(j)}\right\rangle$. Daher entwickelt sich $\left|\varphi_1^0\right\rangle$ unter Wirkung von $\hat{H}$ innerhalb der Zeit $0 \le t \le T$ gemäß

$$\begin{aligned} \hat{U}(t, 0) \left|\varphi_1^0\right\rangle &\stackrel{(0.11)}{=} \alpha \cdot \hat{U}(t, 0) \left|\varphi^{(1)}\right\rangle + \beta \cdot \hat{U}(t, 0) \left|\varphi^{(2)}\right\rangle + \mathcal{O}(\|\hat{W}\|) \\ &\stackrel{(0.13)}{=} \alpha \cdot \exp\left[\frac{tE^{(1)}}{i\hbar}\right] \left|\varphi^{(1)}\right\rangle + \beta \cdot \exp\left[\frac{tE^{(2)}}{i\hbar}\right] \left|\varphi^{(2)}\right\rangle + \mathcal{O}(\|\hat{W}\|) \end{aligned} \tag{0.15}$$

Die Wahrscheinlichkeit $W_{1\to 2}$ zum Zeitpunkt $t=T$ das System im Zustand $\left|\varphi_2^0\right\rangle$ einzutreffen ergibt sich daher als

$$W_{1\to 2} = \left|\left\langle\varphi_2^0\right|\hat{U}(T,0)\left|\varphi_1^0\right\rangle\right|^2 \overset{(0.15)}{=} \left|\frac{\alpha}{N^{(1)}}e^{-i\frac{E^{(1)}}{\hbar}T}(W_{22}-W_{11}+\Delta E)+\frac{\beta}{N^{(2)}}e^{-i\frac{E^{(2)}}{\hbar}T}(W_{22}-W_{11}-\Delta E)+\mathcal{O}(\|\hat{W}\|)\right|^2$$

$$\overset{(0.14)}{=} \frac{|W_{12}|^2}{\Delta E^2}\cdot\left|e^{-i\frac{E^0}{\hbar}T-i\frac{T}{2\hbar}(W_{11}+W_{22})-i\frac{\Delta E}{2\hbar}T}\underbrace{e^{i\mathcal{O}(\|\hat{W}\|^2)}}_{1+\mathcal{O}(\|\hat{W}\|^2)}-e^{-i\frac{E^0}{\hbar}T-i\frac{T}{2\hbar}(W_{11}+W_{22})+i\frac{\Delta E}{2\hbar}T}\underbrace{e^{i\mathcal{O}(\|\hat{W}\|^2)}}_{1+\mathcal{O}(\|\hat{W}\|^2)}+\mathcal{O}(\|\hat{W}\|)\right|^2$$

$$=\frac{|W_{12}|^2}{\Delta E^2}\cdot\left|e^{-i\frac{\Delta E}{2\hbar}T}-e^{i\frac{\Delta E}{2\hbar}T}+\mathcal{O}(\|\hat{W}\|)\right|^2 = \frac{|W_{12}|^2}{\Delta E^2}\cdot\left|-\underbrace{2i\sin\left(\frac{\Delta E}{2\hbar}T\right)}_{\in\mathcal{O}(\|\hat{W}\|)}+\mathcal{O}(\|\hat{W}\|)\right|^2$$

$$\overset{(0.18)}{=} 4\frac{|W_{12}|^2}{\Delta E^2}\cdot\sin^2\left(\frac{\Delta E}{2\hbar}T\right)+\mathcal{O}(\|\hat{W}\|^2)$$

bzw.

$$\boxed{W_{1\to 2} = T^2\cdot\frac{|W_{12}|^2}{\hbar^2}\cdot\operatorname{sinc}^2\left(\frac{\Delta E}{2\hbar}T\right)+\mathcal{O}(\|\hat{W}\|^2)} \tag{0.16}$$

wobei verwendet wurde dass für $r(x)\in\mathcal{O}(x^n), f(x)\in\mathcal{O}(x^m)$ auch

$$e^{r(x)}-1\in\mathcal{O}(x^n) \tag{0.17}$$

und

$$|f(x)-r(x)|^2-|f(x)|^2\in\mathcal{O}(x^{n+\min\{n,m\}}) \tag{0.18}$$

Im Spezialfall $W_{11}=W_{22}$, oszilliert

$$W_{1\to 2} = \sin^2\left(\frac{\Delta E}{2\hbar}T\right)+\mathcal{O}(\|\hat{W}\|^2)$$

bei laufender Zeit T mit einer Periode von $\frac{h}{\Delta E}$.

Zeitabhängige Störungsrechnung

Im Kontext der Zeitabhängigen Störungsrechnung ergibt sich in 1. Ordnung

$$W_{1\to 2} = \left|\left\langle\varphi_2^0\right|\varphi_1^0+\frac{1}{i\hbar}\int_0^T\hat{W}_D(t)\,dt\left|\varphi_1^0\right\rangle\right|^2 = \frac{1}{\hbar^2}\left|\int_0^T\left\langle\varphi_2^0\right|\underbrace{\hat{W}_D(t)}_{e^{i\frac{t}{\hbar}\hat{H}^0}\hat{W}e^{-i\frac{t}{\hbar}\hat{H}^0}}\left|\varphi_1^0\right\rangle\,dt\right|^2$$

$$=\frac{1}{\hbar^2}\left|\int_0^T e^{i\frac{t}{\hbar}(E^0-E^0)}\left\langle\varphi_2^o\right|\hat{W}\left|\varphi_1^0\right\rangle dt\right|^2 = T^2\cdot\frac{|W_{12}|^2}{\hbar^2}$$

was nur für $T\cdot\Delta E\ll\hbar$ mit (0.16) übereinstimmt.