Aufgabe 19

Hamiltonian

$$\hat{\mathrm{H}} = \hat{\mathrm{H}}_0 + \hat{\mathrm{H}}_1 \tag{1}$$

Eigenfunktionen und -Werte zu $\hat{\mathrm{H}}_0$:

$$|\varphi_1^0\rangle, |\varphi_2^0\rangle, \hat{\mathrm{H}}_0|\varphi_i^0\rangle = E_0|\varphi_i^0\rangle, \quad i = 1,2 \tag{2}$$

Erstelle Störmatrix

$$\left(\hat{\mathrm{H}}_{\text{Stör}}\right) = \begin{pmatrix} H_{1,1} & H_{2,1} \\ H_{1,2} & H_{2,2} \end{pmatrix}, \quad H_{i,j} = \langle\varphi_i^0 \left|\hat{\mathrm{H}}_1\right| \varphi_j^0\rangle \tag{3}$$

Es seien nun $|\varphi_1^1\rangle$ und $|\varphi_2^1\rangle$ die beiden Eigenvektoren zu der Matrix $\left(\hat{\mathrm{H}}_{\text{Stör}}\right)$ mit Eigenwerten E_1^1 und E_1^2.
Die Eigenvektoren setzen sich aus den Eigenfunktionen zu $\hat{\mathrm{H}}_0$ zusammen:

$$\varphi_1^1 = a\varphi_1^0 + b\varphi_2^0, \quad \varphi_2^1 = a'\varphi_1^0 + b'\varphi_2^0 \tag{4}$$

Dabei wird im folgenden o.B.d.A. angenommen, dass die Vektoren **bereits normiert** sind.

Für eine 2×2 Matrix erhält man die Eigenwerte zu ($H_{12}W_{21} = |H_{12}|^2$):

$$0 = (H_{11} - E)(H_{22} - E) - |H_{12}|^2 \tag{5}$$

$$= E^2 + E\underbrace{(-H_{11} - H_{22})}_{\alpha} + \underbrace{H_{11}H_{22} - |H_{12}|^2}_{\beta} \tag{6}$$

$$E_1^{(1)/(2)} = -\frac{\alpha}{2} \pm \sqrt{\frac{\alpha^2}{4} - \beta}, \qquad 2\sqrt{\frac{\alpha^2}{4} - \beta} = \Delta E \tag{7}$$

Die Vorfaktoren bestimmt man ausgehend von: $\left(\left(\hat{\mathrm{H}}_{\text{Stör}}\right) - E_1^{(1)/(2)} 1_{2\times 2}\right) \vec{C}_{(1)/(2)} = 0$.
Man erhält:

$$C_{(1)} = \frac{1}{N_1}\begin{pmatrix} 2H_{12} \\ H_{22} - H_{11} + \Delta E \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a/N_1 \\ b/N_1 \end{pmatrix} \qquad C_{(2)} = \frac{1}{N_2}\begin{pmatrix} 2H_{12} \\ H_{22} - H_{11} - \Delta E \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a/N_2 \\ c/N_2 \end{pmatrix} \tag{8}$$

Wobei N_i die entsprechenden Normierungsfaktoren sind.

Aufgabe 20

Die Zeitpropagation geschieht mit dem Propagationsoperator $\hat{\mathrm{U}}$, welcher mit dem Hamiltonoperator kommutiert:

$$\hat{\mathrm{U}}(t, t_0) = \exp\left[\frac{\hat{\mathrm{H}}}{\mathbf{i}\hbar}(t - t_0)\right], \quad \Rightarrow \hat{\mathrm{U}}(t, t_0)|\varphi_j\rangle = \exp\left[\frac{E_j}{\mathbf{i}\hbar}(t - t_0)\right]|\varphi_j\rangle \tag{9}$$

Wobei $E_j = E_0 + E_1^{(j)}$ ist.

Stelle nun $|\varphi_i^0\rangle$ als Linearkombination der gestörten Eigenvektoren dar (vgl. Gleichung 5) und lasse diese propagieren:

$$N_1\varphi_1^1 = a\varphi_1^0 + b\varphi_2^0, \quad N_2\varphi_2^1 = a\varphi_1^0 + c\varphi_2^0, \tag{10}$$

$$\varphi_2^0 = \frac{N_1\varphi_1^1 - N_2\varphi_2^1}{b - c} \quad \Rightarrow \quad \varphi_1^0 = \frac{-cN_1\varphi_1^1 + bN_2\varphi_2^1}{a(b - c)} \tag{11}$$

Unter Anwendung des Propagationsoperators erhält man:

$$a(b-c)\hat{\mathrm{U}}(T,0)|\varphi_1^0\rangle = -cN_1\hat{\mathrm{U}}(T,0)|\varphi_1^1\rangle + bN_2\hat{\mathrm{U}}(T,0)|\varphi_2^1\rangle \tag{12}$$

$$= -cN_1 \exp\left[\frac{E_1}{\mathbf{i}\hbar}T\right]|\varphi_1^1\rangle + bN_2 \exp\left[\frac{E_2}{\mathbf{i}\hbar}T\right]|\varphi_2^1\rangle \tag{13}$$

Die Wahrscheinlichkeit des Übergangs ergibt sich daher zu:

$$W_{1\to 2} = |\langle\varphi_2^0\left|\hat{\mathrm{U}}(T,0)\right|\varphi_1^0\rangle|^2 \tag{14}$$

$$\left|a(b-c)^2\right|^2 W_{1\to 2} = |cN_1^2 \exp\left[\frac{E_1}{\mathbf{i}\hbar}T\right]\langle\varphi_1^1|\varphi_1^1\rangle + bN_2^2 \exp\left[\frac{E_2}{\mathbf{i}\hbar}T\right]\langle\varphi_2^1|\varphi_2^1\rangle|^2 \tag{15}$$

Da $a^2 = -bc$ (folgt aus $||.||$ von (11) oder durch nachrechnen), folgt damit für die Vorfaktoren auf der rechten Seite:

$$cN_1^2 = c(a^2+b^2) = -bc^2 + cb^2$$
$$bN_2^2 = b(a^2+c^2) = +bc^2 - cb^2$$

Für die Vorfaktoren auf beiden Seiten folgt:

$$a(b-c)^2 \cdot X = bc^2 - cb^2 = cb(b-c) = a^2(b-c)$$
$$(b-c)\cdot X = a$$

Mit der Abkürzung $E_g = E_0 - \frac{\alpha}{2}$ folgt weiterhin für die Wahrscheinlichkeit:

$$W_{1\to 2} = \left|\frac{H_{12}}{\Delta E}\right|^2 \left|\exp\left[\frac{E_g - \frac{\Delta E}{2}}{\mathbf{i}\hbar}T\right] - \exp\left[\frac{E_g + \frac{\Delta E}{2}}{\mathbf{i}\hbar}T\right]\right|^2 \tag{16}$$

$$W_{1\to 2} = \left|\frac{H_{12}}{\Delta E}\right|^2 \left|\exp\left[\frac{\mathbf{i}\Delta E}{2\hbar}T\right] - \exp\left[\frac{-\mathbf{i}\Delta E}{2\hbar}T\right]\right|^2 \tag{17}$$

$$W_{1\to 2} = \left|\frac{H_{12}}{\Delta E}\right|^2 \left|-2\mathbf{i}\sin\left(\frac{\Delta E}{2\hbar}T\right)\right|^2 \tag{18}$$

$$W_{1\to 2} = \underline{4\frac{|H_{12}|^2}{\Delta E^2}\sin^2\left(\frac{\Delta E}{2\hbar}T\right)} \quad \approx T^2\frac{|H_{12}|^2}{\hbar^2}, \quad \frac{\Delta E}{2\hbar}T \ll 1 \tag{19}$$

Zeitabhängige Störungsrechnung Bis zur ersten Ordnung ergibt sich allgemein:

$$|\psi(t)\rangle = |\psi(t_0)\rangle + \frac{1}{\mathbf{i}\hbar}\int_{t_0}^{t} \mathrm{d}t_1 \hat{\mathrm{H}}_1^D(t_1)|\psi(t_0)\rangle \tag{20}$$

Wobei $\hat{\mathrm{H}}_1^D$ die Störung im Dirac Bild ist, sie ergibt sich aus dem Schrödingerbild zu:

$$\hat{\mathrm{H}}_1^D = \left[\hat{\mathrm{U}}(t,t_0)\right]^{-1}\hat{\mathrm{H}}_1^S\hat{\mathrm{U}}(t,t_0) \quad \Rightarrow \quad |\psi'{}_1^0\rangle = |\psi_1^0\rangle + \frac{1}{\mathbf{i}\hbar}\int_0^T \mathrm{e}^{-\frac{E_0}{\mathrm{i}\hbar}t}\hat{\mathrm{H}}_1|\psi_1^0\rangle\mathrm{e}^{\frac{E_0}{\mathrm{i}\hbar}t}\,\mathrm{d}t \tag{21}$$

Daraus folgt:

$$\langle\psi_2^0|\psi'{}_1^0\rangle = \underbrace{\langle\psi_2^0|\psi_1^0\rangle}_{0} + \underbrace{\langle\psi_2^0\left|\hat{\mathrm{H}}_1\right|\psi_1^0\rangle}_{H_{12}}\frac{1}{\mathbf{i}\hbar}\int_0^T \mathrm{d}t \quad \Rightarrow \quad \underline{W_{1\to 2} = T^2\frac{|H_{12}|^2}{\hbar^2}} \tag{22}$$

$$\tag{23}$$

Dies stimmt für $\Delta ET \ll 2\hbar$ (siehe (19)) mit obigem Ergebnis überein.