UNIVERSITÄT LEIPZIG
INSTITUT FÜR THEORETISCHE PHYSIK

Quantenmechanik II

Übungsblatt 9
Solutions

24. Wir wiederholen die wichtigsten Formel der Störungstheorie ($\hbar = 1$):

$$\psi_I(t) = e^{iH_0 t}\psi(t), \qquad V_I = e^{iH_0 t}V(t)e^{-iH_0 t},$$

$$i\dot{\psi}_I(t) = V_I(t)\psi_I(t), \qquad \psi_I(t) = U(t,t_0)\psi_I(t_0),$$

$$U(t,t_0) \approx \mathbf{1} - i\int_{t_0}^{t} ds V_I(s) + (-i)^2 \int_{t_0}^{t} ds V_I(s) \int_{t_0}^{s} d\tau V_I(\tau) + \dots$$

Im ersten Ordnung ist die Zeitentwicklung des Zustands (im Schrödengerbild) gegeben durch

$$\psi(t) = \left[e^{-iH_0(t-t_0)} - ie^{-iH_0 t} \int_{t_0}^{t} e^{iH_0 s} V(s) e^{-iH_0 s}\, ds\, e^{iH_0 t_0} \right] \psi(t_0)$$

In unserer Aufgabe ist

$$H_0 = \frac{E\sigma_3}{2}, \qquad V_I = f(t)\sigma_1,$$

mit $f(t) = \alpha\beta/(1+\beta^2 t^2)$. Die Energieeigenzustände erfüllen

$$H_0|0\rangle = -\frac{E}{2}|0\rangle, \qquad H_0|1\rangle = \frac{E}{2}|1\rangle.$$

Für die Übergangswahrscheinlichkeit erhalten wir

$$W_{0\to 1} = |(\langle 1|\psi(t)\rangle|^2 = \left[\alpha \int_{t_0}^{t} ds\, f(s) \right]^2 = \alpha^2 \left[\arctan(\beta t) - \arctan(\beta t)\right]^2,$$

d.h, im Limit $t \to \infty$, $t_0 \to -\infty$ gilt

$$W_{0\to 1} = \pi^2 \alpha^2.$$

Exakte Lösung

Parametrisieren Wir $\psi_I(t)$ durch

$$\psi_I(t) = a(t)|0\rangle + b(t)|1\rangle,$$

so ergeben sich die Gleichungen

$$\begin{aligned} i\dot{a} &= f\, b \\ i\dot{b} &= f\, a, \end{aligned}$$

woraus folgt

$$\frac{d}{f(t)dt}\frac{d}{f(t)dt}\, a = -a.$$

Setzt man $f(t)dt = dx$, d.h.

$$x = \alpha \arctan(\beta t) + c,$$

so folgt

$$a'' = -a,$$

d.h. $a(x) = \cos(x - x_0)$. Nun gehört x zu einem *kompakten* Intervall: für $t \to \pm\infty$ gilt $x \to \pm\frac{\alpha\pi}{2}$. Die “Anfangsbedingung” $\psi_I(t)|_{t\to\infty} = |0\rangle$ mit

$$\cos(-\alpha\pi/2 - x_0) = 1,$$

gleichbedeutend ist. Das führt auf $x_0 = -\alpha\pi/2$, also

$$a(t) = \cos(\alpha \arctan \beta t + \alpha\pi/2).$$

Für $t \to \infty$ finden wir

$$\begin{aligned} |a(t)|^2 &\to \cos^2(\alpha\pi), \\ |b(t)|^2 &\to \sin^2(\alpha\pi). \end{aligned}$$

Damit ist die exakte übergangswahrscheinlichkeit gleich

$$W_{0\to1} = \sin^2(\pi\alpha).$$

25. Die störungstheoretische Übergangswahrscheinlichkeit ist gegeben durch

$$W_{0\to1}(T) = |\langle 1|U(T,0)|0\rangle|^2 = \left[\alpha \int_0^T ds\, \lambda e^{iEs}\right]^2 = \frac{4\lambda^2}{E^2}\sin^2\left(\frac{ET}{2}\right),$$

wobei $|0\rangle$ und $|1\rangle$ jeweils den Grund- und den angeregten Zustand bezeichnen. Diese Wahrscheinlichkeit offenbar oszilliert mit der Frequenz $\frac{E}{2}$; für kleine $E\cdot T$ gilt

$$W_{0\to1}(T) \approx \lambda^2 T^2.$$

Anderseits lässt sich die Übergangswahrscheinlichkeit auch einfach bestimmen, in dem man

$$W^e_{0\to1}(T) = |\langle 1|e^{-iHT}|0\rangle|^2 = |\langle 1|\cos\omega T + i\sigma_i n^i \sin\omega T|0\rangle|^2 = \sin^2(\omega T)|\langle 1|\sigma_i n^i|0\rangle|^2,$$

ausnutzt (der Hamiltonoperator ist zeit-unabhängig). Hier sind: $\omega = \sqrt{(E/2)^2 + \lambda^2}$ und $\vec{n} = (\lambda/\omega, 0, E/2\omega)$ (sodass $\vec{n}^2 = 1$). Wir finden die folgende exakte Form der Übergangswahrscheinlichkeit:

$$W^e_{0\to 1}(T) = \sin^2(\omega T) \cdot \frac{\lambda^2}{\omega^2}.$$

Nun oszilliert $W^e_{0\to 1}(T)$ in der Zeit mit der Frequenz ω, die nur für $\lambda \to 0$ sich der störungstheoretischen Frequenz nähert. Für kleine ωT findet man wieder

$$W^e_{0\to 1}(T) \approx \lambda^2 T^2.$$

Daher stimmen beide Ergebnisse für

$$\left(\frac{E^2}{2} + \lambda^2\right) T^2 \ll 1$$

überein (d.h. für Zeiten T kurz im vergleich zu $1/\lambda$ *und* $1/E$).

Höhere Ordnungen der Störungstheorie

Man kann die Übergangsamplitude auch systematisch in höheren Ordnungen berechnen. Die Amplitude im ersten Ordnung ist

$$\langle 1|U^1|0\rangle = -2i\frac{\lambda}{E}\sin(ET/2).$$

Im zweiten Ordnung verschwindet der Beitrag; im dritten findet man

$$\langle 1|U^3|0\rangle = \left(\frac{-i\lambda}{iE}\right)^3 e^{-iET/2} \int_0^{iET} dx\, e^x \int_0^x dy\, e^{-y} \int_0^y dz\, e^z$$

d.h. insgesamt

$$\langle 1|U^1 + U^3|0\rangle = -2i\frac{\lambda}{E}\sin(ET/2) + i\left(\frac{\lambda}{E}\right)^3 \left[4\sin(ET/2) - 2ET\cos(ET/2)\right].$$

Zu beachten ist, dass die Korrekturen dritter Ordnung nicht nur periodisch sondern auch wachsend in der Zeit T sind. Sie stimmen besser mit dem exakten Ergebniss

$$\langle 1|U_{exakt}|0\rangle = -i\sin(\omega T)\frac{\lambda}{\omega},$$

für kleine T, aber divergieren für $T \to \infty$! (Die Situation wird noch schlimmer im fünften Ordnung.) Wir weisen auch darauf hin, dass die Nullstellen der Amplitude dritter Ordnung auch viel besser mit den Nullstellen der exakten Amplitude übereinstimmen.

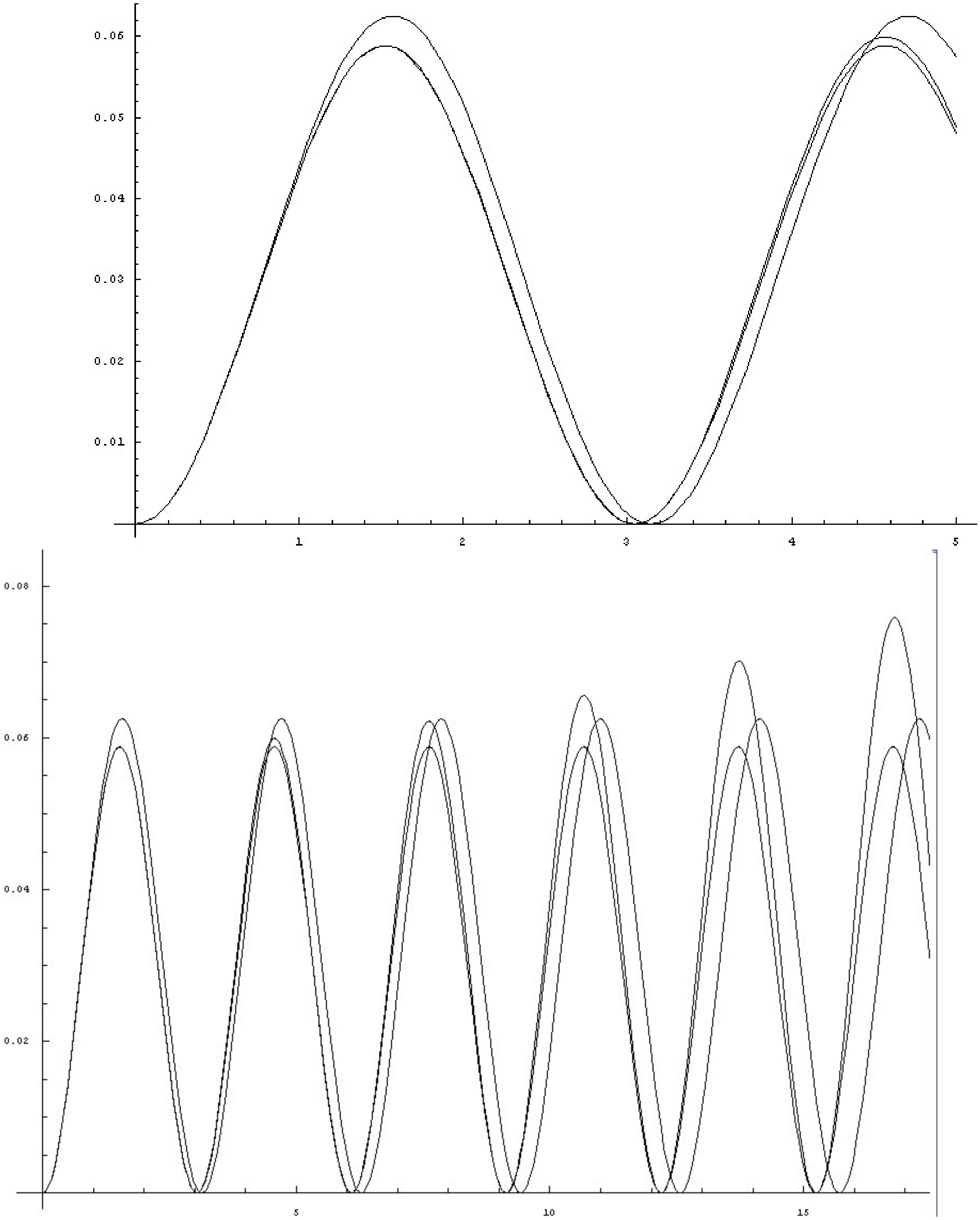

Abbildung 1: Exakte und störungstheoretische (aus U^1 und aus $U^1 + U^3$) Übergangswahrscheinlichkeiten. Hier sind $E = 2, \lambda = 1/2$.

26. Wir lösen das Problem nur in der ersten Ordnung der Störungstheorie. Für die Übergangs-

wahrscheinlichkeit finden wir

$$W_{Pm,S} = \left| \int_0^T e^{i\omega_0 s}(-eE_0)\langle \psi_{Pm}\, z\, \psi_S \rangle \cos \omega s \right|^2 = |d_m|^2 (eE_0)^2 f(T),$$

wobei

$$f(t) = \frac{1}{4} \left| \frac{e^{i(\omega_0+\omega)T} - 1}{i(\omega_0 + \omega)} + \frac{e^{i(\omega_0-\omega)T} - 1}{i(\omega_0 - \omega)} \right|^2 .$$

Nur wenn $d_m = \langle \psi_{Pm}\, z\, \psi_S \rangle \neq 0$ wird die $W_{Pm,S}$ nichtverschwindende Werte annehmen. Nun für $m \neq 0$ verschwindet d_m (bei der Integration über φ). Für $m = 0$ finden wir

$$d_0 = \frac{1}{\sqrt{3}} \int r^3 dr\, \overline{R_1(r)} R_2(r)$$

was im Allgemein ungleich Null ist. Eine Analyse von $f(T)$ zeigt ein Resonanzverhalten bei $\omega - \omega_0 = 0$ (Fermi Golden Rule). Wir schliessen daraus, dass für linear-polarisierten elektromagnetischen Wellen wird es nur Übergänge zwischen S und $P, m = 0$ Niveaus geben (die Erwartungswert des Bahndrehimpulses im Endzustand verschwindet). Die Anregungswahrscheinlichkeit wird gross nur für resonante Wellen, $\omega - \omega_0 = 0$.