Tímaháð truflun

Hingað til höfum við aðeins fjallað um tímaóháð mætti

$$V(\vec{r},t) = V(\vec{r})$$

leyst hreyfijöfnuna

$$i\hbar\partial_t \Psi = H\Psi$$

með aðgreiningu breytistærða

$$\Psi(\vec{r},t) = \psi(\vec{r})e^{-iEt/\hbar}$$

þar sem $\psi(\vec{r})$ uppfyllir tímaóháða jöfnu Schrödingers

$$H\psi = E\psi$$

Eina tímabreytingin sem við höfum séð er þegar upphafsástand kerfis er ekki eiginástand þess

Byrjum að skoða tímaháð mætti með truflanareikningi fyrir mjög einföld kerfi

↑ þægilegt að nota truflanareikning, því mörg hugtök og margt í aðferðafræði okkar var smíðað fyrir tímaóháð kerfi

Tvístiga kerfi

Til þess að einfalda umfjöllun okkar og ná betri skilningi á tímaþróun staðanna við tvístiga kerfi.

Ótruflaða og því „ekki tímaháða" kerfið er með tvo eiginástönd

$$H^0|a\rangle = E_a|a\rangle$$

$$H^0|b\rangle = E_b|b\rangle$$

$$\langle a|b\rangle = \delta_{ab}$$

Hvaða ástand sem er má skrifa sem samantekt þessara

$$|\Psi(0)\rangle = C_a|a\rangle + C_b|b\rangle$$

og ef H^0 er óháður tíma þá er tímaþróun þessa ástands

$$|\Psi(t)\rangle = C_a|a\rangle e^{-\frac{iE_at}{\hbar}} + C_b|b\rangle e^{-i\frac{E_bt}{\hbar}}$$

Við segjum að $|C_a|^2$ séu líkur þess að eindin sé í ástandi a, í raun er $|C_a|^2$ líkurnar á því að orkumæling gefur niðurstöðurnar E_a

Stöðlun: $\longrightarrow |C_a|^2 + |C_b|^2 = 1$

þegar kveikt er á truflun

$$H'(t)$$

fæst

$$|\Psi(t)\rangle = C_a(t)|a\rangle e^{-i\frac{E_a t}{\hbar}} + C_b(t)|b\rangle e^{-i\frac{E_b t}{\hbar}}$$

því $\{|i\rangle, i=a,b\}$ er fullkominn grunnur og við gerum ráð fyrir $H'(t)$ sem getur ekki tekið kerfið út fyrir það rúm.

Við viljum ákvarða $C_a(t)$ og $C_b(t)$

með upphafsskilyrðum t.d.

$$C_a(0) = 1 \;, \quad C_b(0) = 0$$

eindin (eða kerfið) er upphaflega í ástandi $|a\rangle$

Ef fyrir síðari tíma t_1 komi í ljós

$$C_a(t_1) = 0$$
$$C_b(t_1) = 1$$

þá segðum við að eindin eða kerfið hafi „farið" á ástand $|b\rangle$

Hér hafa þegar leiðst
inn truflana hugmyndir,
tengdar 1. stig truflun.

$H'(t)$, jafnvel þó það
verki aðeins í tak-
markaðan tíma, getur
breytt orku kerfisins

↓

Við erum að opna lokaða
kerfið okkar

Eftir að truflun hverfur
aftur er líklegt að
kerfið komist í stöðugt-
ástand, sem er ekki
líklega eigin ástand H^0

Vert er að hafa í huga að $H^0 + H'(t)$
hefur engin eigin ástönd ⟷
um fjöllum okkar er byggð á
truflanareikningi

Hærri meðhöndlun truflunar en 1. stigs
(líka stundum nákvæm ....) gæti leitt
til lýsingar þar sem áhrif H'
koma ekki aðeins fram í færslu-
líkum milli $|a\rangle$ og $|b\rangle$ heldur
líka í breytingum orkustiganna
og hliðrun þeirra

Skoðum tvístiga kerfið okkar

$$i\hbar\partial_t|\Phi(t)\rangle = H|\Phi(t)\rangle$$

með $H = H^0 + H'$

Reynum lausnina

$$|\Phi(t)\rangle = C_a(t)|a\rangle e^{-i\omega_a t} + C_b(t)|b\rangle e^{-i\omega_b t}$$

þ.s. $\omega_i = \frac{E_i}{\hbar}$

$$i\hbar\Big\{\dot{C}_a|a\rangle e^{-i\omega_a t} + \dot{C}_b|b\rangle e^{-i\omega_b t} + \underline{C_a|a\rangle(-i\omega_a)}e^{-i\omega_a t} + \underline{C_b|b\rangle(-i\omega_b)e^{-i\omega_b t}}\Big\}$$

$$= \underline{C_a H^0|a\rangle} e^{-i\omega_a t} + \underline{C_b H^0|b\rangle e}^{-i\omega_b t} + C_a H'|a\rangle e^{-i\omega_a t} + C_b H'|b\rangle e^{-i\omega_b t}$$

sem einfaldast sem

$$i\hbar\Big\{\dot{C}_a|a\rangle e^{-i\omega_a t} + \dot{C}_b|b\rangle e^{-i\omega_b t}\Big\} = C_a H'|a\rangle e^{-i\omega_a t} + C_b H'|b\rangle e^{-i\omega_b t}$$

Innföldum með $\langle a|$

$$\hookrightarrow \; i\hbar \dot{c}_a e^{-i\omega_a t} = c_a \langle a|H'|a\rangle e^{-i\omega_a t} + c_b \langle a|H'|b\rangle e^{-i\omega_b t}$$

táknum $\quad H'_{ij} = \langle i|H'|j\rangle \; , \quad H'_{ji} = (H'_{ij})^*$ hermískur virki

margföldum með $\; -i\dfrac{e^{-i\omega_a t}}{\hbar}$:

$$\dot{c}_a = -\frac{i}{\hbar}\left\{ c_a H'_{aa} + c_b H'_{ab} e^{-i(\omega_b-\omega_a)t} \right\}$$

samskonar meðhöndlun leiðir til

$$\dot{c}_b = -\frac{i}{\hbar}\left\{ c_b H'_{bb} + c_a H'_{ba} e^{+i(\omega_b-\omega_a)t} \right\}$$

Skilgreinum tíðnina

$$\omega_0 = \frac{E_b - E_a}{\hbar}$$

gerum ráð fyrir að $E_b > E_a$ þó það sé ekki nauðsynlegt

Þá erum við með

$$\boxed{i\hbar\partial_t \begin{pmatrix} C_a \\ C_b \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} H'_{aa} & H'_{ab}e^{-i\omega_0 t} \\ H'_{ba}e^{i\omega_0 t} & H'_{bb} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} C_a \\ C_b \end{pmatrix}}$$

Jafngilda jöfnu Schrödingers fyrir tví stiga kerfið okkar án nálgunar

Við munum oftast vinna með kerfi sem uppfylla að $H'_{aa} = 0$ og $H'_{bb} = 0$

Truflanaröð

Við getum heildað jöfnuna

Skrifum hana fyrst sem

$$i\hbar\, d_t \bar{C}(t) = \underset{\text{fylki}}{\mathbb{H}'}\, \underset{}{\overset{\text{vigur}}{\bar{C}}}(t)$$

heildun gefur

$$i\hbar \int_0^t dt'\, d_{t'} \bar{C}(t') = \int_0^t dt'\, \mathbb{H}'(t') \bar{C}(t')$$

$$i\hbar \left\{ \bar{C}(t) - \bar{C}(0) \right\} = \int_0^t dt'\, \mathbb{H}'(t') \bar{C}(t')$$

eða

$$\boxed{\bar{C}(t) = \bar{C}(0) + \frac{1}{i\hbar} \int_0^t ds\, \mathbb{H}'(s) \bar{C}(s)}$$

Volterra heildisjafna af annarri tegund

Þar má leysa með Laplace ummyndun, samleitinni Fredholm röð, eða Neumann röð.

Eins má leysa þar með fallagrunni, eða tímaneti sem algebrískar jöfnur

$$A x = b$$

Neumann röd fast med itrun
jöfunner

0. stigs

$$\bar{C}^{(0)}(t) = \bar{C}(0)$$

1. stigs

$$\bar{C}^{(1)}(t) = \bar{C}(0) + \frac{1}{i\hbar}\int_0^t ds\, H'(s)\, \bar{C}^{(0)}(s) \quad = \quad \left\{1 + \frac{1}{i\hbar}\int_0^t ds\, H'(s)\right\} \bar{C}(0)$$

2. stigs

$$\bar{C}^{(2)}(t) \qquad \left\{1 + \frac{1}{i\hbar}\int_0^t ds\, H'(s) + \left(\frac{1}{i\hbar}\right)^2 \int_0^t ds \int_0^s du\, H'(s) H'(u)\right\} \bar{C}(0)$$

Ef $H'_{aa} = 0$ og $H'_{bb} = 0$

og $C_a(0) = 1$, $C_b(0) = 0$, $\bar{c}(0) = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$

þá verður þetta

0. stigs

$$\left.\begin{aligned} C_a^{(0)}(t) &= 1 \\ C_b^{(0)}(t) &= 0 \end{aligned}\right\} \text{engin breyting}$$

1. stigs

$$\left.\begin{aligned} C_a^{(1)}(t) &= 1 \\ C_b^{(1)}(t) &= -\frac{i}{\hbar} \int_0^t ds\, H'_{ba}(s)\, e^{i\omega_0 s} \end{aligned}\right\}$$

leyst beint úr jöfnunum á síðu 9

2. stigs

$$C_a^{(2)}(t) = 1 - \frac{1}{\hbar^2}\int_0^t ds \int_0^s du\, H'_{ab}(s)\, H'_{ba}(u)\, e^{-i\omega_0(s-u)}$$

$$C_b^{(2)}(t) = -\frac{i}{\hbar}\int_0^t ds\, H'_{ba}(s)\, e^{i\omega_0 s}$$

$\leftarrow$ sama og $C_b^{(1)}$

$|C_a^{(1)}(t)|^2 + |C_b^{(1)}(t)|^2 \neq 1$, en $= 1$ ef 2. stigs liðurinn í H' er sleppt

Við munum síðan beita þessum truflanareikningi á vel þekkt kerfi

Samleitni Neumann röðar er ekki tryggð

Mjög athyglisvert að bera saman niðurstöður truflanareikn. og nákvæmar