Wh: Dirac-Bild $\qquad \hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}(t)$

$$|\psi_D(t)\rangle = e^{i/\hbar \hat{H}_0 t} |\psi(t)\rangle$$

$$= \hat{U}_D(t,t_0) |\psi_D(t_0)\rangle$$

$$\hat{U}_D(t,t_0) = e^{i/\hbar \hat{H}_0 t} \hat{U}(t,t_0) e^{-i/\hbar \hat{H}_0 t_0}$$

$$i\hbar \frac{d}{dt} \hat{U}_D(t,t_0) = \hat{V}_D(t) \hat{U}_D(t,t_0) \quad \text{mit } \hat{V}_D = e^{i/\hbar \hat{H}_0 t} \hat{V}(t) e^{-i/\hbar \hat{H}_0 t}$$

$$\Rightarrow \hat{U}_D(t,t_0) = 1 + \sum_{n=1}^{\infty} (-i)^n \int_{t_0}^{t} dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 \ldots \int_{t_0}^{t_{n-1}} dt_n \, \hat{V}_D(t_1) \ldots \hat{V}_D(t_n) \quad (*)$$

Ausgangspunkt für Störungstheorie!!

Spezialisiere auf zeitunabhängiges Potential

$\hat{V}(t) = \hat{V}$ in den Integralen $\rightarrow$ Kontakt zur Streutheorie

$\Rightarrow$ z.B. im Term zweiter Ordnung

$$A = (-i)^2 \int_{t_0}^{t} dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 \, \hat{V}_D(t_1) \hat{V}_D(t_2)$$

$$= -i \int_{t_0}^{t} dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 \, e^{i/\hbar \hat{H}_0 t_1} \hat{V} \hat{G}_0(t_1 - t_2) \hat{V} e^{-i/\hbar \hat{H}_0 t_2}$$

$$\text{mit } \hat{G}_0(t) = -i e^{-i/\hbar \hat{H}_0 t} \Theta(t) \quad (**)$$

betrachte Fouriertransformierte

Stufenfunktion mit $\Theta(x)=\begin{cases}1, & x\geq 0\\ 0, & x<0\end{cases}$

$$\hat{G}_0(t)=\frac{1}{2\pi}\int d\omega\, e^{-i\omega t}\,\hat{G}_0(\omega)$$

$$\Leftrightarrow \hat{G}_0(\omega)=\int dt\,\hat{G}_0(t)\,e^{i\omega t}$$

$$(**)\longrightarrow\ = -i\int_0^\infty dt\, e^{i(\omega-\hat{H}_0/\hbar)t}$$

$$= -i\left[\frac{e^{i(\omega-\hat{H}_0/\hbar)t}}{i(\omega-\hat{H}_0/\hbar)}\right]_0^\infty$$

Obere Integrationsgrenze liefert keinen Beitrag:

$$\frac{\exp ix}{x}=\frac{\cos x}{x}+i\,\frac{\sin x}{x}\xrightarrow[x\to\infty]{} 0$$

$$\Rightarrow \hat{G}_0^+(\omega)=\frac{1}{\omega+i\varepsilon-\hat{H}_0/\hbar}$$

wichtig, damit bei der Rücktrafo $\hat{G}_0(t)=0$ für $t<0$ gilt

Formal identisch zu unserer Def. der freien Green'schen Funktion $\hat{G}_0^\pm(E)=\frac{1}{E-\hat{H}_0\pm i\varepsilon}$ in der (zeitunabhängigen) Streutheorie!

Zurück zur Gl. ⊛ für den Propagator:

$$\hat{U}_D(t,t_0) = 1 - i\int_{t_0}^{t} dt_1 \underbrace{e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}_0 t_1}\hat{V}e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}_0 t_1}}_{\hat{V}_D}$$

$$-i\int_{t_0}^{t} dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2\, e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}_0 t_1}\hat{V}\hat{G}_0^+(t_1-t_2)\hat{V}e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}_0 t_2}$$

3. Ordnung $\rightarrow$ $\quad -i \ldots \left(\begin{matrix}\text{3 Zeitintegrale} \\ \text{über} \ldots \hat{V}\hat{G}_0^+(t_1-t_2)\hat{V}\hat{G}_0(t_2-t_3)\hat{V}\ldots\end{matrix}\right)$

$-i \ldots$

Betrachte nun Matrixelemente von $\hat{U}_D(t,t_0)$ in Eigenzuständen $|m\rangle, |n\rangle$ von $\hat{H}_0$

$$\left(\hat{H}_0|m\rangle = E_m|m\rangle,\ \hat{H}_0|n\rangle = E_n|n\rangle\right)$$

Begründung:

Sei $|n\rangle$ der "Ausgangszustand", d.h. der Zustand, der vor dem „Einschalten" der Störung zur Zeit t_0 vorliegt

(d.h. $\hat{V}(t) = 0,\ t < t_0$, $\hat{V}(t) = \text{const},\ t > t_0$)

Die Zeitentwicklung von $|n\rangle$ in Anwesenheit von $\hat{V}$ ist durch $\hat{U}_D(t,t_0)$ gegeben

Frage: Was ist die Wahrsch., dass sich das Teilchen zu einer späteren Zeit t in einem anderen Eigenzustand von $\hat{H}_0$, z.B. in $|m\rangle$ befindet?

Endzustand!

Antwort: Übergangswahrscheinlichkeit

$$P_{n\to m}(t) = |\langle m| \hat{U}_D(t,t_0)|n\rangle|^2$$

Dabei ist t der Zeitpunkt der Messung!!

$$\langle m| e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}_0 t_1} \hat{V} e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}_0 t_1} |n\rangle$$
$$e^{\frac{i}{\hbar}E_m t_1} \quad e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t_1}$$

Berechnung:

$$\langle m| \hat{U}_D(t,t_0)|n\rangle = \langle m|n\rangle - i\int_{t_0}^{t} dt_1\, e^{\frac{i}{\hbar}(E_m-E_n)t_1} \cdot \langle m|\hat{V}|n\rangle$$
$$- i\int_{t_0}^{t} dt_1 \int_{t_0}^{t_0} dt_2\, e^{\frac{i}{\hbar}E_m t_1} \langle m| \hat{V}\hat{G}_0(t_1-t_2)\hat{V}|n\rangle \cdot e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t_2}$$

$- i \ldots$ (hier tauchen höhere Produkte der Form $\langle m| \hat{V}\hat{G}_0\hat{V}\hat{G}_0 V \ldots |n\rangle$ auf!

ersetze überall $\hat{G}_0^+(t)$ durch $\frac{1}{2\pi}\int d\omega\, e^{-i\omega t}\, \hat{G}_0^+(\omega)$

$$\Rightarrow \langle m|\hat{U}_D(t,t_0)|n\rangle$$
$$= \delta_{nm} - i\int_{t_0}^{t} dt_1\, e^{i/\hbar (E_m - E_n)t_1} \langle m|\hat{V}|n\rangle$$
$$- i\frac{1}{2\pi}\int d\omega \int_{t_0}^{t} dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2\, e^{i(\frac{E_m}{\hbar}-\omega)t_1} \langle m|\hat{V}\hat{G}_0^+(\omega)\hat{V}|n\rangle \cdot e^{-i(\frac{E_n}{\hbar}-\omega)t_2}$$

$-i \ldots$ (z.B. 3. Ordnung: 3 Integrale über t, 2 Integrale über ω

Wir betrachten nun den Grenzfall

$t_0 \rightarrow -\infty$

$t \rightarrow \infty$

Die Zeit, über die $\hat{V}(t) = \hat{V} \neq 0$, wird unendlich groß!

Formal heißt das, dass alle Integrale von $-\infty$ bis ∞ laufen!

beachte: $$\int_{-\infty}^{\infty} dt\, e^{i/\hbar (E_1 - E_2)t} = 2\pi\,\delta(E_1 - E_2)$$

Deltafunktion!

und (z.B. im Term 2. Ordnung) nach Ausführen der Zeitintegrale

$$\int d\omega \, \delta\left(\frac{E_m}{\hbar}-\omega\right) \underbrace{\delta\left(\frac{E_n}{\hbar}-\omega\right) \underbrace{f(\omega)}_{\langle m|\hat{V}\hat{G}_0^+(\omega)\hat{V}|n\rangle}}_{g(\omega)}$$

$$= g\left(\frac{E_m}{\hbar}\right) = \delta\left(\frac{E_n}{\hbar}-\frac{E_m}{\hbar}\right) \langle m|\hat{V}\hat{G}_0^+(E_m)\hat{V}|n\rangle$$

analog für die höheren Terme (nachrechnen!)

Ergebnis:

$$\lim_{\substack{t\to\infty \\ t_0\to-\infty}} \langle m|\hat{U}_D(t,t_0)|n\rangle = \langle m|\hat{U}_D(\infty,-\infty)|n\rangle$$

$$= \delta_{nm} - 2\pi i\, \delta(E_m-E_n)\, \langle m|\hat{V}|n\rangle$$

Check: Vorfaktoren für die Terme $n \geq 1$

$$-i(2\pi)^2 \frac{1}{2\pi}\, \delta(E_m-E_n)\, \langle m|\hat{V}\hat{G}_0^+(E_m)\hat{V}|n\rangle$$

$$-i \ldots$$

$$= \delta_{nm} - 2\pi i\, \delta(E_m-E_n) \langle m| \underbrace{\hat{V} + \hat{V}\hat{G}_0^+\hat{V} + \hat{V}\hat{G}_0^+\hat{V}\hat{G}_0^+\hat{V} + \ldots}_{} |n\rangle$$

bekannt!
siehe Kap. III.4
$\Rightarrow$ T-Matrix

Insgesamt:

$$\boxed{\langle m|\hat{U}_D(+\infty,-\infty)|n\rangle = \delta_{nm} - 2\pi i\, \delta(E_m-E_n) \langle m|\hat{T}^+(E_n)|n\rangle}$$

Definition:

Die obigen Matrixelemente werden als <u>S-Matrix</u> bezeichnet

also $$\boxed{\begin{aligned} S_{mn} &= \langle m|\hat{U}_D(\infty,-\infty)|n\rangle \\ &= \delta_{mn} - 2\pi i\, \delta(E_m - E_n)\langle m|\hat{T}^+(E_n)|n\rangle \end{aligned}}$$

<u>Bemerkungen</u>:

- Physikalische Bedeutung von S_{mn}

Das Betragsquadrat $|S_{mn}|^2$ entspricht der <u>asymptotischen</u> Übergangswahrscheinlichkeit zwischen dem Ausgangszustand $|n\rangle$ und dem Endzustand $|m\rangle$ (beides sind Eigenzustände von $\hat{H}_0$)

- Erster Term in S_{mn}: δ_{mn}: relevant falls $|m\rangle = |n\rangle$
- Zweiter Term in S_{mn}: $\sim \delta(E_m - E_n)$

Die Übergangswahrsch. ist also nur dann von Null verschieden, falls Energieerhaltung vorliegt (elastische Streuung)

(typisch für <u>zeitunabhängige</u> Störung $\dot{V}(t) = 0$)

• Die Amplitude der Übergangswahrscheinlichkeit (d.h. Stärke der Streuung) wird durch die Matrixelemente $\langle m|\hat{T}^+(E)|n\rangle$ bestimmt

Dies unterstreicht wieder die Bedeutung der T-Matrix!

(wie auch der Zusammenhang

$$f^+(k e_r, \underline{k}) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2}\langle k e_r|\hat{T}^+(E)|\underline{k}\rangle$$

• Voraussetzung für den hergeleiteten Ausdruck für S_{mn}: $t\to\infty$, $t_0\to-\infty$, d.h. Stördauer unendlich

(nur dadurch lassen sich die t- und ω-Integrale in $\langle m|\hat{U}_D(t,t_0)|n\rangle$ geschlossen auswerten!)

III.5.2. Fermis Goldene Regel

Wir betrachten nun eine schwache (im Zeitintervalle konstante) Störung $\hat{V}$

$\Rightarrow$ es liegt nahe, die formale Reihe für $\hat{U}_D(t,t_0)$ nach dem Term erster Ordnung abzubrechen

$$\hat{U}_D(t,t_0) = 1 + \sum_{n=1}^{\infty}(-i)^n\int_{t_0}^{t}dt_1 \dots \int_{t_0}^{t_{n-1}}dt_n\, \hat{V}_D(t_1)\dots\hat{V}_D(t_n)$$

$$\approx 1 - i\int^{t}dt_1\, \hat{V}_D(t_1)$$

t_0

$$= 1 - i\int_{t_0}^{t} dt_1\, e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}_0 t_1}\, \hat{V}\, e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}_0 t_1}$$

Matrixelement: $\langle m|\hat{U}_D(t,t_0)|n\rangle = \langle n|m\rangle - i\int_{t_0}^{t} dt_1\, e^{\frac{i}{\hbar}(E_m-E_n)t_1} \langle m|\hat{V}|n\rangle$

Eigenzustände von $\hat{H}_0$

$$P_{n\to m}(t) = |\langle m|\hat{U}_D(t,t_0)|n\rangle|^2$$

Fokussiere auf den Fall $|m\rangle \neq |n\rangle$

(z.B. ebene Wellen mit derselben Energie $E = \hbar^2 k^2/2m$, aber verschiedene Richtung $\underline{k}$)

$$P_{n\to m}(t) = |\langle m|\hat{V}|n\rangle|^2 \left| \int_{t_0}^{t} dt_1\, e^{\frac{i}{\hbar}(E_m-E_n)t_1} \right|^2$$

$$= |\langle m|\hat{V}|n\rangle|^2 \left(\frac{\sin\left(\frac{\omega_{mn}(t-t_0)}{2}\right)}{\omega_{mn}/2} \right)^2$$

mit $\omega_{mn} = \frac{1}{\hbar}(E_m - E_n)$

Umschreiben als Übergangsrate: (Übergangswahrscheinl. pro Zeit)

$$\frac{P_{n\to m}(t)}{t-t_0} = |\langle m|\hat{V}|n\rangle|^2 \underbrace{\left(\frac{\sin\left(\frac{\omega_{mn}(t-t_0)}{2}\right)}{\omega_{mn}(t-t_0)/2} \right)^2 (t-t_0)}$$

Diskussion dieser Funktion ausführlich im Buch von Nolting

Wir sind interessiert am Limes $t - t_0 \to \infty$
also wirklich unendlich große Dauer der Störung!

Benutze folgenden Zusammenhang:

$$\lim_{\varepsilon \to 0} \frac{1}{\varepsilon} f\left(\frac{x}{\varepsilon}\right) = \delta(x) \quad \left(\text{mit} \int_{-\infty}^{\infty} dx\, f(x) = 1\right)$$

setze hier: $f(x) = \frac{1}{\pi} \frac{\sin^2 x}{x^2}$, $x = \frac{\omega_{mn}}{2}$

und $\varepsilon = \frac{1}{t - t_0}$

Einsetzen

$$\Rightarrow \Gamma_{mn} = \lim_{(t-t_0) \to \infty} \frac{1}{t-t_0} P_{n \to m}(t)$$

$$= |\langle m|\hat{V}|n\rangle|^2 \lim_{\underbrace{(t-t_0)^{-1}}_{\varepsilon} \to 0} \underbrace{(t-t_0)}_{\frac{1}{\varepsilon}} \pi f\Big(\underbrace{\frac{\omega_{mn}}{2}}_{x} \underbrace{(t-t_0)}_{\frac{1}{\varepsilon}}\Big)$$

$$= |\langle m|\hat{V}|n\rangle|^2 \pi\, \delta\left(\frac{\omega_{mn}}{2}\right)$$

Erinnerung: $\omega_{mn} = \frac{1}{\hbar}(E_m - E_n)$

$$\Rightarrow \boxed{\Gamma_{mn} = 2\pi\hbar \, |\langle m|\hat{V}|n\rangle|^2 \, \delta(E_m - E_n)}$$

Fermis Goldene Regel !

Bemerkungen:

- Die Herleitung der Goldenen Regel ist eigentlich widersprüchlich: Wir nehmen einerseits an, dass $\hat{V}$ schwach $\Leftrightarrow$ auch die Störungen klein sein sollte.
  Andererseits haben wir $t - t_0 \to \infty$ gesetzt!

(Interpretations-"Ausweg":
Wir nehmen an, dass t ist groß gegenüber mikroskopische Einschaltprozesse, aber klein aus makroskopischer Sicht)