$\hat{G}(z) = (z - \hat{H})^{-1}$, $z = E \pm i\varepsilon$, $\hat{G}_0(z) = (z - \hat{H}_0)^{-1}$

voller Green'scher Operator

Dyson-Gl.: $\hat{G} = \hat{G}_0 + \hat{G}_0 \hat{V} \hat{G}$

Lippmann-Schwinger-Gl. $|\psi_{\underline{k}}^{(\pm)}\rangle = |\underline{k}\rangle + \hat{G}_0^{(\pm)}(E)\, \hat{V}\, |\psi_{\underline{k}}^{(\pm)}\rangle$

$= |\underline{k}\rangle + \hat{G}^{(\pm)}(E)\, \hat{V}\, |\underline{k}\rangle$

"T-Matrix": $\hat{T}(z) = \hat{V} + \hat{T}(z)\, \hat{G}_0(z)\, \hat{V}$

exakt!

(iterieren)

$= \hat{V} + \hat{V}\hat{G}_0\hat{V} + \hat{V}\hat{G}_0\hat{V}\hat{G}_0\hat{V} + \ldots$ Betrachte dies als Stör-Reihe im Streupotential $\hat{V}$!

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

Born'sche Näherung: $f^+_{Born}(k\underline{e}_r, \underline{k}) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \langle k\underline{e}_r |\, \hat{V}\, | \underline{k} \rangle$

III.5. Zeitabhängige Störungstheorie

$\rightarrow$ Beschreibung zeitabhängiger Streuvorgänge, Übergangswahrscheinlichkeiten

Ausgangspunkt: Zeitabhängige SG: $i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle = \hat{H}\, |\psi(t)\rangle$

Zustand zur Zeit t: $|\psi(t)\rangle = \hat{U}(t, t_0)\, |\psi(t_0)\rangle$

Zeitentwicklungsoperator (unitär) „Propagator"

$\hat{H}$ nicht explizit zeitabhängig: $\hat{U}(t, t_0) = e^{-i/\hbar\, \hat{H}(t - t_0)}$

(nicht explizit zeitabhängig, $\hat{H}_0 = \frac{\hat{p}^2}{2m}$

Sei jetzt: $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}(t)$)

Benutze Wechselwirkungsbild (Dirac-Bild) der Dynamik (Wiederholung)

Operatoren: $\underbrace{\hat{A}_D}_{\text{Dirac}}(t) = e^{i/\hbar\, \hat{H}_0 t}\, \underbrace{\hat{A}_S}_{\text{Schrödinger}}\, e^{-i/\hbar\, \hat{H}_0 t}$, $|\psi_D(t)\rangle = e^{i/\hbar\, \hat{H}_0 t}\, \underbrace{|\psi(t)\rangle}_{\text{Schrödinger}}$

Zeitabhängigkeit der Dirac-Zustände:

$i\hbar \frac{d}{dt} |\psi_D(t)\rangle = \underbrace{\hat{V}_D(t)}_{\text{Störung!}}\, |\psi_D(t)\rangle$, $\hat{V}_D = e^{i/\hbar\, \hat{H}_0 t}\, \hat{V}\, e^{-i/\hbar\, \hat{H}_0 t}$

Zeitentwicklungsoperator: $\hat{U}_D(t,t_0) = e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}_0 t} \underbrace{\hat{U}(t,t_0)}_{\text{Schrödinger}} e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}_0 t}$

$$\boxed{i\hbar \frac{d}{dt} \hat{U}_D(t,t_0) = \hat{V}_D(t)\, \hat{U}_D(t,t_0)} \quad (*)$$

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

Betrachte (*). Formale Darstellung von $\hat{U}_D(t,t_0)$ durch Integration und Iteration von (*)

aus (*): $\hat{U}_D(t,t_0) = \underbrace{\hat{U}_D(t_0,t_0)}_{1} - i \int_{t_0}^{t} dt_1\, \hat{V}_D(t_1)\, \hat{U}_D(t_1,t_0)$

$$\hat{U}_D(t_0,t_0) = e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}_0 t_0} \underbrace{\hat{U}(t_0,t_0)}_{1} e^{+\frac{i}{\hbar}\hat{H}_0 t_0} = 1$$

$$\Rightarrow \hat{U}_D(t,t_0) = 1 - i \int_{t_0}^{t} dt_1\, \hat{V}_D(t_1)\, \hat{U}_D(t_1,t_0)$$

$$\overset{\text{Iteration}}{=} 1 - i \int_{t_0}^{t} dt_1\, \hat{V}_D(t_1) + (-i)^2 \int_{t_0}^{t} dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2\, \hat{V}_D(t_1)\hat{V}_D(t_2) + \dots$$

$$(**) \quad \boxed{\hat{U}_D(t,t_0) = 1 + \sum_{n=1}^{\infty} (-i)^n \int_{t_0}^{t} dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 \dots \int_{t_0}^{t_{n-1}} dt_n\, \hat{V}_D(t_1)\, \hat{V}_D(t_2) \dots \hat{V}_D(t_n)}$$

Entwicklung in Potenzen von $\hat{V}$ (Störung, Störpotential)

III.5.1. Zeitunabhängiges Potential

(physikalisch: Störung wirkt über einen langen, aber dennoch endlichen Zeitbereich)

also $\underbrace{\hat{V}(t)}_{\text{Schrödingerbild}} = \hat{V} = \text{const}$

Betrachte für diesen Fall die Integranden in (**)

$$(n=1) \quad \hat{V}_D(t_1) = e^{i/\hbar \hat{H}_0 t} \hat{V} e^{-i/\hbar \hat{H}_0 t}$$

$$(n=2) \quad \hat{V}_D(t_1) \hat{V}_D(t_2) = e^{i/\hbar \hat{H}_0 t_1} \hat{V} \underbrace{e^{-i/\hbar \hat{H}_0 t_1} e^{i/\hbar \hat{H}_0 t_2}}_{e^{-i/\hbar \hat{H}_0 (t_1 - t_2)}} \hat{V} e^{-i/\hbar \hat{H}_0 t_2}$$

$(n=3)$ ...

Beachte auch: in den Integralen in (**) ist $t_2 \le t_1$, $t_3 \le t_2$ ...

Das können wir formal durch die Einführung von Stufenfunktionen beschreiben

z.B. $n=2$:

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

$$\boxed{\text{mit } \Theta(x) = \begin{cases} 1, & x \ge 0 \\ 0, & x < 0 \end{cases}}$$

$$= (-i)^2 \int_{t_0}^{t} dt_1 \int_{t_0}^{t} dt_2 \; e^{i/\hbar \hat{H}_0 t_1} \hat{V} e^{-i/\hbar \hat{H}_0 (t_1 - t_2)} \Theta(t_1 - t_2) \hat{V} e^{-i/\hbar \hat{H}_0 (t_2)}$$

Führe ein: $\hat{G}_0^+(t) = -i e^{-i/\hbar \hat{H}_0 t} \theta(t)$

$(n=2)$

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

Die Funktion $\hat{G}_0^+(t)$ hat einen engen Bezug zu Funktion $\hat{G}_0^+(E)$ in der zeitunabhängigen Streutheorie (Kap. III.3, III.4)

Betrachte dazu die Fouriertransformierte

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

mit (hier ohne Beweis) $\hat{G}_0^+(\omega) = \dfrac{1}{\omega + i\varepsilon - \hat{H}_0/\hbar}$ $\quad (\varepsilon \to 0)$

Das ist formal identisch zu unserer Def. des freien Green'schen Operators

$$\hat{G}_0^+(E) = \frac{1}{E - \hat{H}_0 + i\varepsilon} \quad , \quad \varepsilon \to 0 \qquad (E = \hbar\omega\ !)$$

Zurück zur Gleichung (**) für den Zeitentwicklungsoperator

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

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

(**)

$$- i \int_{t_0}^{t} dt_1 \int_{t_0}^{t} dt_2 \int_{t_0}^{t} dt_3\, e^{i/\hbar \hat{H}_0 t_1}\, \hat{V}\, \hat{G}_0(t_1 - t_2)\, \hat{V}\, \hat{G}_0(t_2 - t_3)\, \hat{V} e^{-i/\hbar \hat{H}_0 t_3}$$

$$+ \ldots$$

Betrachte nun Matrixelemente der Form $\langle m | \hat{U}_D(t,t_0) | n \rangle$

mit $|m\rangle, |n\rangle$ Eigenzustände von $\hat{H}_0$

also $\hat{H}_0 |m\rangle = E_m |m\rangle$

$$e^{i/\hbar \hat{H}_0 t} |m\rangle = e^{i/\hbar E_m t} |m\rangle$$

<u>Idee dahinter:</u>

Die Störung $\hat{V}$ wird erst zu einem best. Zeitpunkt (t_0) "eingeschaltet"

Vor diesem Zeitpunkt befand sich das System im Eigenzustand $|n\rangle$ von $\hat{H}_0$

Die Störung wirkt über einen endlichen Zeitraum

Frage: Was ist die Wahrscheinl., dass ~~..~~ sich das Teilchen nach der Störung in einem anderen Eigenzustand $|m\rangle$ von $\hat{H}_0$ befindet?

Antwort: Übergangswahrscheinlichkeit

$$P_{n\to m}(t) = |\langle m|\underbrace{\hat{U}_D(t,t_0)|n\rangle}_{\text{Zustand zu Zeit } t \text{ im Dirac-Bild!}}|^2$$

Aus (**)

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

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

$$- i\iiint \ldots$$

... in den Integranden treten immer Matrixelemente von Produkten der Form $\hat{V}\hat{G}_0^+\hat{V}\hat{G}_0^+\hat{V}\ldots$ auf

allererster Term: $\langle m|n\rangle = \delta_{mn}$ (Zustände orthonormiert)

dritter Term, höhere Terme: ersetze $\hat{G}_0(t)$ durch Fouriertransformierte

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

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

$$- i\frac{1}{2\pi}\int d\omega \int_{t_0}^{t} dt_1 \int_{t_0}^{t} dt_2\, e^{i\left(\frac{E_m}{\hbar} - \omega\right)t_1} \langle m|\hat{V}\hat{G}_0^+(\omega)\hat{V}|n\rangle\, e^{-i\left(\frac{E_n}{\hbar} - \omega\right)t_2}$$

$$- i \ldots$$

(z.B. Term 3. Ordnung: drei Integrale über die Zeiten t_1, t_2, t_3
zwei " über die Frequenzen ω_1, ω_2)

usw.

Vereinfachung der Integrale durch Betrachtung des Grenzfalls.

$t_0 \to -\infty \quad , \quad t \to \infty$

$\Rightarrow$ alle Zeitintegrale in $\langle m|\hat{U}_D|n\rangle$ werden zu Integralen von $-\infty$ bis $+\infty$!

benutze: $\int_{-\infty}^{\infty} dt \, e^{\frac{i}{\hbar}Et} = 2\pi \, \delta(E)$

und $\int d\omega \, \delta(E_m/\hbar - \omega) \, \delta(E_n/\hbar - \omega) \, f(\omega) = \delta\left(\frac{E_m}{\hbar} - \frac{E_n}{\hbar}\right) f(E_m)$

$$\Rightarrow \langle m|\hat{U}_D(t, t_0)|n\rangle \quad (t \to \infty, \; t_0 \to -\infty)$$

$\boxed{\omega = \frac{E}{\hbar}}$!

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

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

$$- i \ldots$$

$$= \delta_{nm} - 2\pi i \, \delta\left(E_m/\hbar - E_n/\hbar\right) \langle m|\underbrace{\hat{V} + \hat{V}\hat{G}_0^+\hat{V} + \hat{V}\hat{G}_0^+\hat{V}\hat{G}_0^+\hat{V} + \ldots}_{\text{bekannt! entspricht gerade der in Kap. III.4. eingeführten T-Matrix!}}|n\rangle$$

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

mit $\hat{T}^+(E_n) = \hat{T}(E_n + i\varepsilon) \, , \varepsilon \to 0$

Formel exakt !

Definition: Die oben betrachteten Matrixelemente werden in Zukunft als Elemente der S-Matrix bezeichnet.

$$S_{mn} = \langle m | \hat{U}_D(\infty, -\infty) | n \rangle$$

Bemerkungen

- Physikalische Bedeutung: Das Betragsquadrat $|S_{mn}|^2$ entspricht den asymptotischen Übergangswahrscheinlichkeiten vom Anfangszustand $|n\rangle$ in den Zustand $|m\rangle$ (beides Eigenzustände von $\hat{H}_0$)

- Erster Term (δ_{mn}): relevant, falls $|m\rangle = |n\rangle$

  Im Sinne der Streutheorie entspricht dies dem Betrag des durchgehenden Anteils der Welle

- Zweiter Term: $(\sim \delta(E_m - E_n))$

  Dieser drückt Energieerhaltung aus! Also elastische Streuung

  Das geht nur dann, wenn das Energieniveau entartet ist

- Die Größe von S_{mn} (bzw. Stärke der Streuung) wird durch die T-Matrix $\hat{T}^+(E)$ bestimmt

  $\Rightarrow \hat{T}$ hat zentrale Bedeutung!

  (wie auch für die Streuamplitude
  $f^+(\underline{k}_{en}, \underline{k}) = \frac{-m}{2\pi\hbar^2} \langle \underline{k}_{en} | \hat{T}^+(E) | \underline{k} \rangle$)

Erinnerung: $\hat{T} = \hat{V} + \hat{T}\hat{G}_0\hat{V}$ exakt

$$= V + \hat{V}\hat{G}_0\hat{V} + \hat{V}\hat{G}_0\hat{V}\hat{G}_0\hat{V} + \ldots$$

Ausgangspunkt für Näherungen!