

Lippmann-Schwinger-Gl.:  $|\psi_{\pm}^{(\pm)}\rangle = |k\rangle + \hat{G}_0^{(\pm)}(E) \hat{V} |\psi_{\pm}^{(\pm)}\rangle$ ,  $\hat{G}_0^{(\pm)}(E) = \frac{1}{E \pm i\epsilon - \hat{H}_0}$

umgeschrieben:  $|\psi_{\pm}^{(\pm)}\rangle = |k\rangle + \hat{G}^{(\pm)}(E) \hat{V} |k\rangle$

$\hat{G}^{(\pm)}(E) = \frac{1}{E \pm i\epsilon - \hat{H}}$ ,  $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}$

Dyson-Gl.:  $\hat{G}(z) = \hat{G}_0(z) + \hat{G}_0(z) \hat{V} \hat{G}(z)$   
(resolvent)

Ausgangspunkt für (iterative) Störungskorrekturen

oder:  $\hat{G}(z) = \hat{G}_0(z) + \hat{G}_0(z) \hat{T}(z) \hat{G}_0(z)$

T-Matrix

$\hat{T}(z) = \hat{V} + \hat{T}(z) \hat{G}_0(z) \hat{V}$   
 $= \hat{V} + \hat{V} \hat{G}_0(z) \hat{V} + \hat{V} \hat{G}_0(z) \hat{V} \hat{G}_0(z) \hat{V} + \dots$

Streuamplitude:

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

### III.6. Zeitabhängige Störtheorie

→ Beschreibung zeitabhängiger Störvorgänge, Übergangswahrscheinlichkeiten  
 (Wechselwirkung mit  
 Streu- (Stör-)  
 potential  $\hat{V}$ )

Ausgangspunkt:

zeitabhängige SG:  
 (Schrödinger-Gl.)

$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle = \hat{H} |\psi(t)\rangle$

mit  $\hat{H}$  voller Hamiltonian  
 (inkludiert Störung  $\hat{V}$ )

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

(Zeitentwicklungsoperator (unitär)  
 „Propagator“)

es gilt (folgt aus der SG):  $i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \hat{U}(t, t_0) = \hat{H} \hat{U}(t, t_0)$

$(\hat{U}(t_0, t_0) = 1)$

Falls speziell  $\hat{H}$  zeitunabhängig  $\Rightarrow \hat{U}(t, t_0) = e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H} (t - t_0)}$   
 (nicht explizit  
 Zeitabh.)

Wechselwirkungsbild (Dirac-Bild) der Dynamik

sei  $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}(\epsilon)$

Zeitunabhängig, z.B.  $\hat{H}_0 = \frac{\hat{p}^2}{2m}$

Dirac-Operatoren:  $\hat{A}_D(t) = e^{i\frac{\hat{H}_0}{\hbar}t} \hat{A}_S e^{-i\frac{\hat{H}_0}{\hbar}t}$

also: Zeitabhängig gegeben durch  $\hat{H}_0$ !

Zugehöriger Operator im Schrödingerbild  
(typischerweise Zeitunabhängig)

Dirac-Zustände:  $|\psi_D(t)\rangle = e^{i\frac{\hat{H}_0}{\hbar}t} |\psi(t)\rangle$

Zustand im Schrödingerbild

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{d}{dt} |\psi_D(t)\rangle &= (i\hbar) \left( i\frac{\hat{H}_0}{\hbar} \right) e^{i\frac{\hat{H}_0}{\hbar}t} |\psi(t)\rangle + i\hbar e^{i\frac{\hat{H}_0}{\hbar}t} \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle \\ &= -\hat{H}_0 e^{i\frac{\hat{H}_0}{\hbar}t} |\psi(t)\rangle + e^{i\frac{\hat{H}_0}{\hbar}t} \hat{H} |\psi(t)\rangle \\ &= -\hat{H}_0 |\psi_D(t)\rangle + e^{i\frac{\hat{H}_0}{\hbar}t} \hat{H} e^{-i\frac{\hat{H}_0}{\hbar}t} e^{i\frac{\hat{H}_0}{\hbar}t} |\psi(t)\rangle \\ &= -\hat{H}_0 |\psi_D(t)\rangle + \hat{H}_D(t) |\psi_D(t)\rangle \\ &= \hat{V}_D(t) |\psi_D(t)\rangle \end{aligned}$$

der Zustände  
Dynamik ist durch

$\hat{V}_D(t) = \hat{H}_D(t) - \hat{H}_0 = e^{i\frac{\hat{H}_0}{\hbar}t} \hat{V}(\epsilon) e^{-i\frac{\hat{H}_0}{\hbar}t}$

gegeben?

Zeitentwicklungsoperator im Dirac-Bild

$\hat{U}_D(t, t_0) = e^{i\frac{\hat{H}_0}{\hbar}(t-t_0)} \hat{U}(t, t_0) e^{-i\frac{\hat{H}_0}{\hbar}(t-t_0)}, \quad \hat{U}_D(t_0, t_0) = \mathbb{1}$   
 (Propagator im Schrödinger-Bild)

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{d}{dt} \hat{U}_D(t, t_0) &= i\hbar i\frac{\hat{H}_0}{\hbar} \hat{U}_D(t, t_0) \\ &+ i\hbar e^{i\frac{\hat{H}_0}{\hbar}t} \frac{d}{dt} \hat{U}(t, t_0) e^{-i\frac{\hat{H}_0}{\hbar}t} \\ &= \hat{V}_D(t) \hat{U}_D(t, t_0) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= -\hat{H}_0 \hat{U}_D(t, t_0) + e^{i\hat{H}_0 t} \hat{H} \hat{U}(t, t_0) e^{-i\hat{H}_0 t_0} \\
&\quad \uparrow \hat{H} = e^{-i\hat{H}_0 t} + i\hat{H}_0 t \\
&= -\hat{H}_0 \hat{U}_D(t, t_0) + \hat{H}_D(t) \hat{U}_D(t, t_0)
\end{aligned}$$

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

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

Jetzt Darstellung von  $\hat{U}_D(t, t_0)$  durch Integration und Herleitung seiner Beugungsgl.

$$\frac{d}{dt} \hat{U}_D(t, t_0) = \frac{1}{i\hbar} \hat{V}_D(t) \hat{U}_D(t, t_0) = -\frac{i}{\hbar} \hat{V}_D(t) \hat{U}_D(t, t_0)$$

$$\begin{aligned}
\Rightarrow \hat{U}_D(t, t_0) &= \underbrace{\hat{U}_D(t_0, t_0)}_1 - i \int_{t_0}^t dt_1 \hat{V}_D(t_1) \hat{U}_D(t_1, t_0) \quad (\text{setze } t_0=1) \\
&= 1 - i \int_{t_0}^t dt_1 \hat{V}_D(t_1) + (-i)^2 \int_{t_0}^t dt_1 \int_{t_0}^{t_1} \hat{V}_D(t_1) \hat{V}_D(t_2) + \dots
\end{aligned}$$

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

Störreihe:  $\hat{U}_D$  in Potenzen der Störpotenz  $\hat{V}_D(t)$ !

### III.6.1 Zeitunabhängige Potenzial

Motivation: Diese Betrachtung liefert Bezug zur vorher diskutierten Störtheorie!

Wir betrachten weiterhin die Integrale in (\*) für den Fall  $\vec{V}(t) = \vec{V} = \text{const}$

Frage: Wie sehen dann die (ersten) Terme in der Reihe für  $\vec{U}_D(t, t_0)$  aus?

z.B.  $\vec{U}_D(t_1) \vec{U}_D(t_2) = e^{i\frac{\hbar}{\hbar} H_0 t_1} \vec{V} e^{-i\frac{\hbar}{\hbar} H_0 t_1} e^{i\frac{\hbar}{\hbar} H_0 t_2} \vec{V} e^{-i\frac{\hbar}{\hbar} H_0 t_2}$

entsprechend für  $\vec{U}_D$  Produkte in  $\mathcal{H}_D$

betrachte nun Zeitintegral.

$$A \text{ (Term 2. Ordng)} = (-i)^2 \int_{t_0}^t dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 \vec{U}_D(t_1) \vec{U}_D(t_2) = (-i)^2 \int_{t_0}^t dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 e^{i\frac{\hbar}{\hbar} H_0 t_1} \vec{V} e^{-i\frac{\hbar}{\hbar} H_0 (t_1 - t_2)} \vec{V} e^{-i\frac{\hbar}{\hbar} H_0 t_2}$$

es gilt:  $t_2 \leq t_1$

Das kann formal durch Einfügen einer Heaviside-Funktion schreiben

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

$$A = (-i)^2 \int_{t_0}^t dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 e^{i\frac{\hbar}{\hbar} H_0 t_1} \vec{V} e^{-i\frac{\hbar}{\hbar} H_0 (t_1 - t_2)} \Theta(t_1 - t_2) \vec{V} e^{-i\frac{\hbar}{\hbar} H_0 t_2}$$

Führe ein:  $\vec{G}_0^+(t) = -i e^{-i\frac{\hbar}{\hbar} H_0 t} \Theta(t)$

$$\Rightarrow A = -i \int_{t_0}^t dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 e^{-i\frac{\hbar}{\hbar} H_0 t_1} \vec{G}_0^+(t_1 - t_2) \vec{V} e^{-i\frac{\hbar}{\hbar} H_0 t_2}$$

analog kann man die beiden Terme umschreiben!

Es gilt:  $\vec{G}_0(t)$  hat einen engen Bezug zur Funktion  $\vec{G}_0^+(t)$  in der Streutheorie!

Betrachte dazu die Fourierreue Transformation.

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

$$\text{es gilt: } \vec{g}_0^+(\omega) = \frac{1}{\omega + i\epsilon - \frac{\hat{H}_0}{\hbar}}, \quad \epsilon \rightarrow 0^+$$

Das ist formal identisch zu unserer Def. der "freien" Green'schen Funktion in der Streutheorie!

Zurück zu unserer Störpertinthe für die Propagator:

$$\begin{aligned} \hat{U}_D(t, t_0) &= 1 - i \int_{t_0}^t dt_1 e^{-i \frac{\hat{H}_0}{\hbar} (t-t_1)} \hat{V} e^{-i \frac{\hat{H}_0}{\hbar} (t_1-t_0)} \\ &\quad - i \int_{t_0}^t dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 e^{i \frac{\hat{H}_0}{\hbar} (t-t_1)} \hat{V} \vec{g}_0^+(t_1-t_2) \hat{V} e^{-i \frac{\hat{H}_0}{\hbar} (t_2-t_0)} \\ &\quad + \dots \text{ (mit Produkten } \hat{V} \vec{g}_0^+ \hat{V} \vec{g}_0^+ \hat{V} \dots \text{)} \end{aligned}$$

Betrachte nun Matrixelement der Fern  $\langle m | \hat{U}_D(t, t_0) | n \rangle$ , wobei  $|m\rangle, |n\rangle$  Eigenzustände von  $\hat{H}_0$  sind!

Erinnerung: Wir sind interessiert an Übergangswahrsch.  $P_{nm}(t) = |\langle m | \hat{U}_D(t, t_0) | n \rangle|^2$   
 Hier handelt es sich um Situation, wo das System nach und nach die Störung in einen Eigenzustand von  $\hat{H}_0$  ist  
 (Kosteluz = Störung  $\hat{V}(t)$  wirkt nur über einen bestimmten Zeitraum)

Erinnere auch:  $\hat{U}_D(t, t_0) | \psi(t_0) \rangle$  ist der Zustand, in dem sich  $|\psi(t_0)\rangle$  befindet

Aus (\*\*)

$$\begin{aligned} \langle m | \hat{U}_D(t, t_0) | n \rangle &= \langle m | n \rangle - i \int_{t_0}^t dt_1 e^{i \frac{E_m - E_n}{\hbar} (t-t_1)} \langle m | \hat{V} | n \rangle \\ &\quad - i \int_{t_0}^t dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 e^{i \frac{E_m}{\hbar} (t-t_1)} \langle m | \hat{V} \vec{g}_0^+(t_1-t_2) \hat{V} | n \rangle e^{-i \frac{E_n}{\hbar} (t_2-t_0)} \end{aligned}$$

+ ...

benutze:

• im ersten Term:  $\langle m | n \rangle = \delta_{mn}$  Eigenzustände von  $H_0$  sind orthogonal!

• dritter Term ( $\sim \hat{V}^3$ )

ersetze  $\hat{G}_0^+(t)$  durch Fourier-Transformierte,  $\hat{G}_0^+(t) = \frac{1}{2\pi} \int d\omega e^{-i\omega t} \hat{G}_0^+(\omega)$   
 analog für die höheren Terme!

$$\begin{aligned} \langle m | \hat{U}_D(t, t_0) | n \rangle &= \delta_{mn} - i \int_{t_0}^t dt_1 e^{i(E_m - E_n)t_1} \langle m | \hat{V} | n \rangle \\ &\quad - i \frac{1}{2\pi} \int_{t_0}^t d\omega_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 \int_{t_0}^{t_2} dt_3 e^{i(\frac{E_m}{\hbar} - \omega_1)t_1} \langle m | \hat{V} \hat{G}_0^+(\omega_1) \hat{V} | n \rangle \\ &\quad e^{-i(\frac{E_n}{\hbar} - \omega_2)t_2} \\ &\quad + \dots \text{ Terme höherer Ordnung} \end{aligned}$$

z.B. Term  $\sim \hat{V}^3$ : enthält drei Integrale über die Zeit und zwei " über die Frequenz!

Wir betrachten nur den Grenzfall:

$$\begin{aligned} t_0 &\rightarrow -\infty \\ t &\rightarrow +\infty \end{aligned} \quad \text{in allen Zeitintegralen!}$$

Physikalisch:  $t_0 \rightarrow -\infty \hat{=}$  lange vor dem Streuvorgang

$t \rightarrow +\infty \hat{=}$  lange nach dem Streuvorgang

benutze:

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

$$\text{und } \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \delta\left(\frac{E_m}{\hbar} - \omega\right) \overbrace{\delta\left(\frac{E_n}{\hbar} - \omega\right) f(\omega)}^{g(\omega)} = g\left(\frac{E_m}{\hbar}\right) = \delta\left(\frac{E_n}{\hbar} - \frac{E_m}{\hbar}\right) f\left(\frac{E_m}{\hbar}\right)$$

Man erhält

$$\langle m | \hat{U}_D(t \rightarrow \infty, t_0 \rightarrow -\infty) | n \rangle$$

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

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

+ ...

$$= \delta_{nm} - 2\pi i \delta\left(\frac{E_m}{\hbar} - \frac{E_n}{\hbar}\right) \langle m | \underbrace{\hat{V} + \hat{V} \hat{G}_0^+ \hat{V} + \hat{V} \hat{G}_0^+ \hat{V} \hat{G}_0^+ \hat{V} + \dots}_{\text{Entwicklung der T-Matrix}} | n \rangle$$

Entwicklung der T-Matrix  
(s. Streutheorie!)

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

T-Matrix

Definition:

Die diesen Matrixelemente werden in Zukunft als Elemente der "S-Matrix" (Streumatrix) bezeichnet

$$S_{mn} = \langle m | \hat{U}_D(\overset{t}{\infty}, \overset{t_0}{-\infty}) | n \rangle$$

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

Bemerkungen:

- Das Betragsquadrat  $|S_{mn}|^2$  entspricht den Übergangswahrsch.  $P_{n \rightarrow m}$

Zwischen den Eigenzustände (von  $H_0$ )  $|n\rangle$  und  $|m\rangle$

↑  
Ausgangszustand

↳ Endzustand

- Erster Term:  $d_{nn} = 1$  falls  $|m\rangle = |n\rangle$

Das entspricht (im Sinne der Streutheorie) dem durchgehenden Anteil ( $\sim e^{i(k \cdot x)}$ ) des Streuzustands nach der Streuung

- Zweiter Term: enthält  $\delta(E_m - E_n)$ : Reflexion Energieerhaltung, aber elastische Streuung!

- Die eigentlich interessanteste Größe in  $S_{mn}$  sind die Matrixelemente der  $T$ -Matrix:

$$\langle m | \underline{T(E)} | n \rangle$$

Darum erlaubt man die zentrale Rolle der  $T$ -Matrix!

Erinnerung: es gilt:

$$\underline{T} = \underline{V} + \underline{T} \underline{G}_0 \underline{V} \quad \text{exakt}$$

$$= \underline{V} + \underline{V} \underline{G}_0 \underline{V} + \underline{V} \underline{G}_0 \underline{V} \underline{G}_0 \underline{V} + \dots$$

außerdem:

Streuamplitude im zeitunabh. Fall:  $f^+(k_{er}, k) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \langle k_{er} | \underline{T}^+(E) | k \rangle$