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

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

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

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

Ausgangspunkt für (iterative) Störungsreihen

oder: $\hat{G}(z) = \hat{G}_0(z) + \hat{G}_0(z)\,\underbrace{\hat{T}(z)}_{\text{T-Matrix}}\,\hat{G}_0(z)$, $\hat{T}(z) = \hat{V} + \hat{T}(z)\hat{G}_0(z)\hat{V}$

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

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

III.6. Zeitabhängige Störungstheorie

$\Rightarrow$ Beschreibung zeitabhängiger Streuvorgänge (Wechselwirkung mit Streu-(Störungs-)potential V), Übergangswahrscheinlichkeiten

Ausgangspunkt:

zeitabhängige SG (Schrödinger-Gl.): $i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\psi(t)\rangle = \hat{H}\,|\psi(t)\rangle$

mit $\hat{H}$ voller Hamiltonian (inklusive 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 (nicht explizit zeitabh.) $\Rightarrow \hat{U}(t,t_0) = e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}(t-t_0)}$

Wechselwirkungsbild (Dirac-Bild) der Dynamik

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

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

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

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

Zugehöriger Operator im Schrödingerbild (typischerweise Zeitunabhängig)

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

Zustand im Schrödingerbild

$$i\hbar \frac{d}{dt}|\psi_D(t)\rangle = (i\hbar)\left(\tfrac{i}{\hbar}\hat{H}_0\right) e^{i/\hbar \hat{H}_0 t}|\psi(t)\rangle + i\hbar\, e^{i/\hbar \hat{H}_0 t}\frac{d}{dt}|\psi(t)\rangle$$

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

$$= -\hat{H}_0|\psi_D(t)\rangle + e^{i/\hbar \hat{H}_0 t}\hat{H}\underbrace{e^{-i/\hbar \hat{H}_0 t} e^{i/\hbar \hat{H}_0 t}}_{1}|\psi(t)\rangle$$

$$= -\hat{H}_0|\psi_D(t)\rangle + \hat{H}_D(t)|\psi_D(t)\rangle$$

$$= \hat{V}_D(t)|\psi_D(t)\rangle$$

Dynamik der Zustände ist durch

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

gegeben!

Zeitentwicklungsoperator im Dirac-Bild

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

Propagator im Schrödinger-Bild

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

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

$$\hat{1} = e^{-i/\hbar \hat{H}_0 t} e^{+i/\hbar \hat{H}_0 t}$$

$$= -\hat{H}_0 \hat{U}_D(t,t_0) + \hat{H}_D(t) \hat{U}_D(t,t_0)$$

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

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 Iteration seiner Bewegungsgl.

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

(setze $\hbar = 1$)

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

$$= 1 - i \int_{t_0}^{t} dt_1 \, \hat{V}_D(t_1) + (-i)^2 \int_{t_0}^{t} dt_1 \int_{t_0}^{t_1} \hat{V}_D(t_1) \hat{V}_D(t_2) + \ldots$$

(*)

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

Störungsreihe: $\hat{U}_D$ in Potenzen des Störpotentials $\hat{V}_D(t)$!

III.6.1 Zeitunabhängiges Potential

Motivation: Diese Betrachtung liefert Bezug zur vorher diskutierten Störungstheorie!

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

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

z.B. $\hat{V}_D(t_1)\hat{V}_D(t_2) = e^{i/\hbar \hat{H}_0 t_1}\,\hat{V}\,e^{-i/\hbar \hat{H}_0 t_1}\,e^{i/\hbar \hat{H}_0 t_2}\,\hat{V}e^{-i/\hbar \hat{H}_0 t_2}$

entsprechend für höhere Produkte in V_D

betrachte nun Zeitintegrale:

$$\underset{\text{(Term 2. Ordnung)}}{A} = (-i)^2 \int_{t_0}^{t} dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2\, \hat{V}_D(t_1)\hat{V}_D(t_2) = (-i)^2 \int_{t_0}^{t} dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2\, e^{i/\hbar \hat{H}_0 t_1}\,\hat{V}\,e^{-i/\hbar \hat{H}_0 (t_1-t_2)}\,\hat{V}\,e^{-i/\hbar \hat{H}_0 t_2}$$

es gilt: $t_2 \leq t_1$

Das kann formal durch Einführen einer Stufenfunktion schreiben

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

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

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

$$\Rightarrow \boxed{\underset{\text{Term 2. Ordnung}}{A} = -i \int_{t_0}^{t} dt_1 \int_{t_0}^{t} dt_2\, e^{-i/\hbar \hat{H}_0 t_1}\,\hat{V}\,\hat{G}_0^+(t_1-t_2)\,\hat{V}\,e^{-i/\hbar \hat{H}_0 t_2}}$$

analog kann man die höheren Terme umschreiben!

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

Betrachte dazu die Fouriertransformierte:

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

es gilt: $\hat{G}_0^+(\omega) = \dfrac{1}{\omega + i\varepsilon - \hat{H}_0/\hbar}$, $\varepsilon \to 0$ $(\varepsilon > 0)$

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

Zurück zu unserer Störungsreihe für den Propagator:

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

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

$$+ \ldots \left(\text{Terme mit Produkten } \hat{V}\hat{G}_0^+\hat{V}\hat{G}_0^+ V \ldots\right)$$

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

Erinnerung: Wir sind interessiert an Übergangswahrsch. $P_{n \to m}(t) = |\langle m | \hat{U}_D(t,t_0) | n \rangle|^2$
Hier Vorliebe an Situation, wo das System nach und vor der Streuung in einem Eigenzustand von $\hat{H}_0$ ist
(Vorstellung: 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 den sich $|\psi(t_0)\rangle$ entwickelt

Aus (**)

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

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

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

$+ \ldots$

benutze:

- im ersten Term: $\langle m|n\rangle = \delta_{mn}$ Eigenzustände von $\hat{H}_0$ sind orthonormiert!

- dritter Term $(\sim \hat{V}^2)$

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

  analog für die höheren Terme!

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

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

$+ \ldots$ Terme höherer Ordnung:

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

<u>Wir betrachten nur den Grenzfall</u>:

$t_0 \to -\infty$
$t \to +\infty$ in allen Zeitintegralen!

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

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

benutze:

$$\int_{-\infty}^{\infty} dt\, e^{i\frac{1}{\hbar}Et} = 2\pi\,\delta(E)$$

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

Man erhält:

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

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

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

$$+ \ldots$$

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

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

Definition:

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

$$\boxed{\begin{aligned} S_{mn} &= \langle m|\hat{U}_D(\overset{t}{\infty}, \overset{t_0}{-\infty})|n\rangle \\ &= \delta_{nm} - 2\pi i\, \delta\left(\frac{E_m}{\hbar}-\frac{E_n}{\hbar}\right) \langle m|\hat{T}^+(E_n)|n\rangle \end{aligned}}$$

Bemerkungen:

- Das Betragsquadrat $|S_{mn}|^2$ entspricht der Übergangswahrsch. $P_{n\to m}$ zwischen den Eigenzuständen (von $\hat{H}_0$) $|n\rangle$ und $|m\rangle$

  $|n\rangle$: Ausgangszustand, $|m\rangle$: Endzustand

- Erster Term (in S_{mn}): $\delta_{nm} = 1$ falls $|m\rangle = |n\rangle$

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

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

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

  $\langle m|\hat{T}^+(E)|n\rangle$

Daran erkennt man die zentrale Rolle der T-Matrix!

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

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

außerdem:

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