

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \underbrace{\lambda \hat{V}(t)}_{\text{Störung, } \lambda \text{ klein}}$$

Übergangswahrscheinlichkeit:

$$W_{mk} := |\langle m^{(0)} | \psi(t) \rangle|^2$$

Von Zustand  $|k^{(0)}\rangle$   
des ungestörten Systems

in einen Zustand  $|m^{(0)}\rangle$  des ungestörten

Systems (implizit: Störung hat nur endliche Zeitdauer!)

Zustandswicklung aus dem

Anfangszustand  $|\psi(t=0)\rangle = |k^{(0)}\rangle$

$$m \neq k: W_{mk} = \lambda^2 |g_{mk}^{(1)}(t)|^2$$

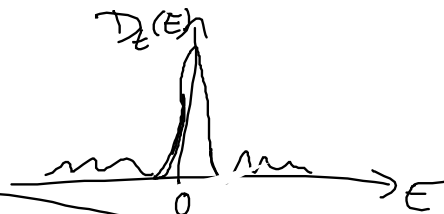
1. Ordnung - Störungstheorie



$$\text{mit } g_{mk}^{(1)}(t) = \frac{1}{i\hbar} \int_0^t dt' e^{i\frac{1}{\hbar}(E_m^{(0)} - E_k^{(0)})t'} \langle m^{(0)} | \hat{V}(t') | k^{(0)} \rangle$$

$$\Rightarrow W_{mk} = \lambda^2 |\langle m^{(0)} | \hat{V} | k^{(0)} \rangle|^2 D_t(E_m^{(0)} - E_k^{(0)})$$

$t \rightarrow \infty$ :



$$\tilde{W}_{mk} = \frac{W_{mk}}{t} \approx \frac{2\pi}{\hbar} \lambda^2 |\langle m^{(0)} | \hat{V} | k^{(0)} \rangle|^2 \delta(E_m^{(0)} - E_k^{(0)}) \quad \text{Fermi's Golden Rule}$$

Diskussion

i) Voraussetzung  $t \rightarrow \infty$ , also auch  $t_a \rightarrow \infty$   
wirdt eigensinnig, denn Störungstheorie sollte ja von kleineren  
(d.h. auch kurzen) Störungen ausgehen!

Argument:  $t_a, t \rightarrow \infty$  bedeutet „groß“ gegenüber Erseckungsvorgängen!

ii) ebenfalls problematisch: Auftreten der Delta-Funktion, deren Wahrsch. und auch Übergangswahrsch. endlich sein!

Umgeschrieben von  $\tilde{w}_{mk}$  für Systeme mit quasi-kontinuierliche Energieniveaus

$$w_{mk}^{\Delta E^0}(t) = \int_{\Delta E^0} dE^{(0)} \underbrace{g(E^{(0)})}_{\text{Zustandsdichte:}} w_{mk}(t) \approx g(E_m^{(0)}) \left( \frac{m^{(0)} \bar{V}}{h^3} \right)^2$$

$\int_{\Delta E^0} dE^{(0)} D_E(E)$   
 Übergangswahrsch. von Anfangszustand  $|k^{(0)}\rangle$  in ein Energieintervall  $\Delta E^0$  und  $E_m^{(0)}$   
 $g(E^{(0)}) dE^{(0)}$  ist die Zahl der unbesetzten Eigenzustände im Intervall  $\Delta E^0$

⇒ Delta-Funktion fällt damit nicht mehr auf!

iii) Fazit aus Fermi's Goldener Regel:

Für zeitlich konstante Störungen (im Intervall  $0 \leq t \leq t_0$ )

gibt es (aufgrund des Auftretens der Delta-Funktion)

nur Übergänge zw. Zustände gleicher Energie

≙ Zustände zu entarteten Niveaus!

### Einstrub

"Herleitung" von Fermi's Goldener Regel im Wechselwirkungsbild (Dirac-Bild) der Dynamik

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

Wari!

Drac-Operatoren  $\hat{A}_D(t) = e^{+i\hat{H}_0 t} \hat{A} e^{-i\hat{H}_0 t}$

Drac-Zustände  $|\psi_D(t)\rangle = e^{i\hat{H}_0 t} |\psi(t)\rangle$  Schwäche

$\Rightarrow$  bei  $t=0$ :  $|\psi_D(0)\rangle = |\psi(0)\rangle$

Wiederholung!

Zeitentwicklung der Zustände

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\psi_D(t)\rangle = \hat{V}_D(t) |\psi_D(t)\rangle$$

Zeitentwicklung: bestimmt durch den Störterm in  $\hat{H}$ !

Dynamik des Zeitentwicklungsoperators

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

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

Schwäche

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

Formale Lösung der Differentialgleichung  $\textcircled{*}$  für  $\hat{U}_D$ :

$$\textcircled{**} \hat{U}_D(t, t_0) = \underbrace{\hat{U}(t_0, t_0)}_{\text{Konstante}} - i \int_{t_0}^t dt_1 \hat{V}_D(t_1) \hat{U}_D(t_1, t_0)$$

formal exakt aber implizite Gleichung!

Idee: Wenn wir  $\hat{U}_D(t, t_0)$  kennen, dann können wir auch die Übergangswahrsch. berechnen, denn...

$$W_{k \rightarrow m}(t) = \left| \langle m^{(0)} | \underbrace{\hat{U}_D(t, t_0)}_{\text{Zeitentwicklung des Anfangszustands } |k^{(0)}\rangle} | k^{(0)} \rangle \right|^2$$

Um  $\hat{U}_D(t, t_0)$  näherungsweise zu bestimmen, löst man  $\text{**}$  iterativ bis zu einer bestimmten Ordnung

$$\begin{aligned} \hat{U}_D(t, t_0) &= \underbrace{\hat{U}_D(t, t_0)}_{\text{Konstante (1)}} - i \int_{t_0}^t dt_1 \hat{V}_D(t_1) \hat{U}_D(t_1, t_0) \\ &= 1 - i \int_{t_0}^t dt_1 \hat{V}_D(t_1) + (-i)^2 \int_{t_0}^t dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 \hat{V}_D(t_1) \hat{V}_D(t_2) \\ &\quad + \mathcal{O}((\hat{V}_D)^3) \end{aligned}$$

Für die "Herleitung" von Fermi's Goldener Regel brechen wir die Iteration nach der ersten Ordnung ab!

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

$$W_{k \rightarrow m}(t) = \left| \langle m^{(0)} | \hat{U}_D(t, t_0) | k^{(0)} \rangle \right|^2$$

$$\begin{aligned}
\langle m^{(0)} | \hat{U}_D(t, t_0) | k^{(0)} \rangle &= \langle m^{(0)} | k^{(0)} \rangle \\
&\quad - i \int_{t_0}^t \langle m^{(0)} | e^{i \hat{H}_0(t-t_1)} \hat{V} e^{-i \hat{H}_0(t_1-t_0)} | k^{(0)} \rangle dt_1 \\
&= \underbrace{\langle m^{(0)} | k^{(0)} \rangle}_{\delta_{mk}} - i \int_{t_0}^t dt_1 e^{i(E_m^{(0)} - E_k^{(0)})t_1} \langle m^{(0)} | \hat{V} | k^{(0)} \rangle
\end{aligned}$$

$$\Rightarrow \langle m^{(0)} | \hat{U}_D(t, t_0) | k^{(0)} \rangle = -i \int_{t_0}^t dt_1 \langle m^{(0)} | \hat{V} | k^{(0)} \rangle e^{i(E_m^{(0)} - E_k^{(0)})t_1}$$

$$W_{k \rightarrow m}(\epsilon) \sim |\langle m^{(0)} | \hat{U}_D | k^{(0)} \rangle|^2$$

Zeitabhängige Störperturbation (einfach) für zeitl. periodische Störungen

$$\begin{aligned}
\hat{H}_1(t) &= (\hat{V}(t)) \\
&= \frac{\hat{F}}{2} e^{-i\omega t} + \frac{\hat{F}^\dagger}{2} e^{+i\omega t} \quad \left. \vphantom{\hat{H}_1(t)} \right\} \hat{H}_1 \text{ ist hermitisch}
\end{aligned}$$

$\omega$ : Frequenz der Störung

Annahme: Störung wird eingeschaltet bei  $t=0$

- Stördauer: sehr groß gegen  
Einschaltvorgang  
 $t, t_0 \rightarrow \infty$

$$W_{k \rightarrow m} = |g_m(t)|^2 \quad (\text{oder über Matrixelement mit Zeitentwicklungsoperator})$$

$$\text{mit } g_m(t) = -\frac{i}{\hbar} \int_0^t dt' e^{i \frac{1}{\hbar} (E_m^{(0)} - E_k^{(0)} - \hbar \omega) t'} \langle m^{(0)} | \hat{F} | k^{(0)} \rangle$$

$$-\frac{i}{\hbar} \int_0^t dt' e^{i \frac{1}{\hbar} (E_m^{(0)} - E_k^{(0)} + \hbar \omega) t'} \langle m^{(0)} | \hat{F}^\dagger | k^{(0)} \rangle$$

$$= -\langle m^{(0)} | \hat{F} | k^{(0)} \rangle e^{\frac{i \frac{1}{\hbar} (E_m^{(0)} - E_k^{(0)} - \hbar \omega) t}{E_m^{(0)} - E_k^{(0)} - \hbar \omega} - 1}$$

Jeder dieser Terme hat die Struktur wie im Falle der Zeitentwicklungsgleichung

$$-\langle m^{(0)} | \hat{F}^\dagger | k^{(0)} \rangle e^{\frac{i \frac{1}{\hbar} (E_m^{(0)} - E_k^{(0)} + \hbar \omega) t}{E_m^{(0)} - E_k^{(0)} + \hbar \omega} - 1}$$

$$|g_m(t)|^2 = |\langle m^{(0)} | \hat{F} | k^{(0)} \rangle|^2 \mathcal{D}_t(E_m^{(0)} - E_k^{(0)} - \hbar \omega) + |\langle m^{(0)} | \hat{F}^\dagger | k^{(0)} \rangle|^2 \mathcal{D}_t(E_m^{(0)} - E_k^{(0)} + \hbar \omega) + \text{Mischterme}$$

- wir wissen im Limes  $t \rightarrow \infty$  gilt  $\mathcal{D}_E(E) \sim \delta(E)$
- die Mischterme sind demgegenüber vernachlässigbar (oszillierend in  $t$ )

⇒ für große Zeiten

$$\tilde{w}_{k \rightarrow m} = \frac{w_{k \rightarrow m}(t)}{t} \approx \frac{2\pi}{\hbar} |\langle m^{(0)} | \hat{F} | k^{(0)} \rangle|^2 \int \delta(E_m^{(0)} - E_k^{(0)} - \hbar\omega) + \frac{2\pi}{\hbar} |\langle m^{(0)} | \hat{F} | k^{(0)} \rangle|^2 \delta(E_m^{(0)} - E_k^{(0)} + \hbar\omega)$$

Übergangsrate (\*)

Diskussion von (\*)

1. Term: nur ungleich Null für  $\underbrace{E_m^{(0)} - E_k^{(0)}}_{\text{Energiedifferenz}} = \hbar\omega > 0$

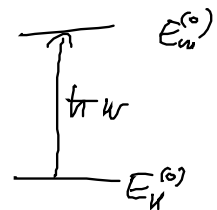
↙ Frequenz des Systems

physikalisch:

Übergang des ungestörten Systems von der Energie  $E_k^{(0)}$  zur Energie  $E_m^{(0)} > E_k^{(0)}$

durch Adsorption eines Lichtquants (Photon) mit der Energie  $\hbar\omega$

„induzierte Adsorption“



2. Term in (\*):

nur ungleich Null für  $E_m^{(0)} - E_k^{(0)} = -\hbar\omega$

$$\Leftrightarrow E_k^{(0)} - E_m^{(0)} = \hbar\omega$$

„induzierte Emission“