

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_1(t) \quad \text{explizit zeitabhängig}$$

$$\hat{H}_1(t) = \lambda \hat{V}(t)$$

Energie klein
Störgröße
→ Fokus auf
Zeitentwicklung
des Zustands

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

Entwicklung: $|\psi(t)\rangle = \sum_n c_n(t) |n^{(0)}\rangle$ $\hat{H}_0 |n^{(0)}\rangle = E_n^{(0)} |n^{(0)}\rangle$

$$\langle n^{(0)} | \psi(t) \rangle$$

Einsetzen und
von links mit
 $\langle m^{(0)} |$ multiplizieren

$$|\psi(t=0)\rangle = |n^{(0)}\rangle \Rightarrow c_n(t=0) = \delta_{nn}$$

$$\Rightarrow i\hbar \frac{d}{dt} c_m(t) = E_m^{(0)} c_m(t) + \sum_n c_n(t) \langle m^{(0)} | \hat{H}_1(t) | n^{(0)} \rangle$$

Benennung:
Für das ungestörte System wissen wir:

$$|\psi_0(t)\rangle = \sum_n c_n^{(0)}(t) |n^{(0)}\rangle$$

$$\text{mit } c_n^{(0)}(t) = e^{-\frac{i}{\hbar} E_n^{(0)} t} \delta_{nn}$$

$$= e^{-\frac{i}{\hbar} E_n^{(0)} t} |n^{(0)}\rangle$$

Hierdurch motiviert schreiben wir die Koeffizienten $c_n(t)$ für das voll wechselwirkende System noch etwas um...

$$c_n(t) = e^{-\frac{i}{\hbar} E_n^{(0)} t} g_n(t)$$

Zeitentwicklung
des ungestörten
System (zur Energie $E_n^{(0)}$)
Korrekturefaktor !

⇒ Umschreiben von (*) in eine Diff. Gleichung für die Korrelationsfunktion $g_n(t)$!

$$\text{Zunächst } \frac{d}{dt} C_m(t) = -\frac{i}{\hbar} E_m^{(0)} C_m(t) + e^{-iE_m^{(0)}t/\hbar} \frac{d}{dt} g_m(t)$$

Einsetzen in (*)

$$\begin{aligned} \cancel{E_m^{(0)} C_m(t)} + i\hbar \frac{d}{dt} g_m(t) e^{-iE_m^{(0)}t/\hbar} \\ = \cancel{E_m^{(0)} C_m(t)} + \sum_n e^{iE_n^{(0)}t/\hbar} g_n(t) \langle m^{(0)} | \hat{H}_1(t) | n^{(0)} \rangle \end{aligned}$$

$$\Rightarrow \boxed{i\hbar \frac{d}{dt} g_m(t) = \sum_n e^{iE_n^{(0)}t/\hbar} (E_m^{(0)} - E_n^{(0)}) g_n(t) \langle m^{(0)} | \hat{H}_1(t) | n^{(0)} \rangle}$$

Satz von Diff. Gleichung erster Ordnung für die Korrelationsfunktion $g_m(t)$

exakt!!

Anfangsbedingung:

$$\begin{aligned} |k(t=0)\rangle &\stackrel{!}{=} |k^{(0)}\rangle \\ \Leftrightarrow g_n(t=0) &= \delta_{nk} \quad \leftarrow t=0! \\ \Rightarrow g_n(t=0) &= e^{+iE_n^{(0)} \cdot 0} C_n(t=0) \\ &= \delta_{nk} \end{aligned}$$

Weiteres Vorgehen:

Entwickle nun die $g_n(t)$ nach Potenzen von λ

← Störparameter

$$g_n(t) = g_n^{(0)}(t) + \lambda g_n^{(1)}(t) + \lambda^2 g_n^{(2)}(t) + \dots$$

Einsetzen in (***) und Sortieren der beiden Seiten nach Potenzen von λ

$$\text{Beachte: } \hat{H}_1(t) = \lambda \hat{V}(t)$$

$$i\hbar \frac{d}{dt} g_m^{(0)}(t) + \lambda i\hbar \frac{d}{dt} g_m^{(1)}(t) + \lambda^2 i\hbar \frac{d}{dt} g_m^{(2)}(t) + \mathcal{O}(\lambda^3)$$

$$= \sum_n e^{i\frac{t}{\hbar}(E_m^{(0)} - E_n^{(0)})} \left(\lambda \langle m^{(0)} | \hat{V}(t) | n^{(0)} \rangle g_n^{(0)}(t) + \lambda^2 \langle m^{(0)} | \hat{V}(t) | n^{(0)} \rangle g_n^{(1)}(t) + \mathcal{O}(\lambda^3) \right)$$

Betrachte wieder getrennt die Gleichungen in der Ordnung λ^p

$$\underline{p=0} \quad i\hbar \frac{d}{dt} g_m^{(0)}(t) = 0 \quad \Leftrightarrow \quad g_m^{(0)}(t) = \text{const}!!$$

Konsistenz mit unserer Annahme für das ungestörte System!
($\lambda=0$)

$$|\psi(t)\rangle \rightarrow |\psi_0(t)\rangle = \sum_n c_n^{(0)}(t) |n^{(0)}\rangle$$

$$\text{mit } c_n^{(0)}(t) = e^{i\frac{t}{\hbar}E_n^{(0)}} \delta_{nn}$$

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

$$\Rightarrow g_m^{(0)}(t) = e^{i\frac{1}{\hbar} E_m^{(0)} t} c_m^{(0)}(t) \\ = e^{i\frac{1}{\hbar} (E_m^{(0)} - E_k^{(0)}) t} \delta_{mk} = \delta_{mk}$$

Beachte nun:

p=1 $i\hbar \frac{d}{dt} g_m^{(1)}(t) = \sum_n e^{i\frac{1}{\hbar} (E_m^{(0)} - E_n^{(0)}) t} \langle m^{(0)} | \hat{V}(t) | n^{(0)} \rangle g_n^{(0)}(t)$

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

Diff. gleichung für den Korrekturfaktor in 1. Ordnung
Störtheorie !!

Formale Lösung für $m \neq k$

$$\Rightarrow g_m^{(1)}(t=0) = 0$$

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

Entwicklung:

$$|\psi(t=0)\rangle = \sum_n c_n(t) |n^{(0)}\rangle \\ = \sum_n e^{-i\frac{1}{\hbar} E_n^{(0)} t} g_n^{(0)} |n^{(0)}\rangle$$

Anfangsbedingung!

$$\Rightarrow g_m^{(1)}(t) = \frac{1}{i\hbar} \int_0^t dt' e^{i\frac{1}{\hbar} (E_m^{(0)} - E_n^{(0)}) t'} \langle m^{(0)} | \hat{V}(t') | k^{(0)} \rangle$$

($m \neq k$) ⊗

Damit: Zeitentwicklung in 1. Ordnung Störungstheorie
ist gegeben durch:

$$| \psi(t) \rangle = \sum_n e^{-\frac{i}{\hbar} E_n^{(0)} t} g_n(t) | n^{(0)} \rangle \quad \text{exakt}$$

$$\approx \sum_n e^{-\frac{i}{\hbar} E_n^{(0)} t} \left(g_n^{(0)}(t) + \lambda g_n^{(1)}(t) \right) | n^{(0)} \rangle$$

mit $g_n^{(0)}(t) = \delta_{nk}$
 $g_n^{(1)}(t)$ aus $(*)$

Bemerkung:

(um $(*)$ herzuleiten, sind wir im wesentlichen wie bei der
zeitunabhängigen Störungstheorie vorgegangen (Störpotentiale von
Koeffizienten)

Es geht auch eleganter!

Nämlich im Dirac-Bild der Dynamik! (evtl. später....)

Wir betrachten nun die sogenannte Übergangswahrscheinlichkeit

$\hat{=}$ Wahrsch., zu Zeit t den Zustand $| m^{(0)} \rangle$ zu finden,
wenn das System zu Zeit $t=0$ im Zustand $| k^{(0)} \rangle$ war
($m \neq k$)

Idee dahinter

Störungen wirken häufig nur für eine begrenzte Zeit.

Vor und nach dieser Zeit wird das System durch \vec{H}_0 alleine bestimmt und kann daher nur in einem Eigenzustand von \vec{H}_0 sein!

Definition:

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

Übergangswahrsch.
von $|k^{(0)}\rangle$
zu $|m^{(0)}\rangle$

$$\text{mit } |\psi(t)\rangle = \sum_n e^{i \frac{E_n^{(0)}}{\hbar} t} g_n(t) |n^{(0)}\rangle$$

$$\text{und } g_n(t=0) = \delta_{nk}$$

$$\Rightarrow w_{mk} = \left| \sum_n g_n(t) \underbrace{\langle m^{(0)} | n^{(0)} \rangle}_{\delta_{mn}} \right|^2 \underbrace{e^{-i \frac{E_m^{(0)}}{\hbar} t + i \frac{E_k^{(0)}}{\hbar} t}}_1$$

$$= |g_m(t)|^2$$

Beachte:

k -Abhängigkeit steckt in der Anfangsbedingung! $g_m(t=0) = \delta_{mk}$

Nähere $g_m(t)$ in 1. Ordnung Störperturbation
und fokussiere auf den Fall $m \neq k$

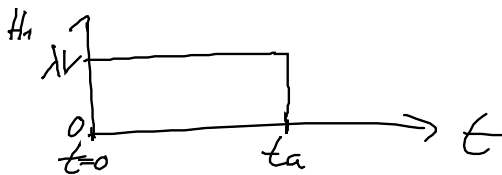
$$g_m(t) \approx \underbrace{g_m^{(0)}(t)}_0, \text{ da } m \neq k + i) g_m^{(1)}(t) = -i \int g_m^{(0)}(t')$$

$$\Rightarrow \boxed{W_{mk} = \lambda^2 |g_m^{(0)}(\epsilon)|^2}$$

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

Auswertung von W_{mk} (mit $m \neq k$) für konkrete Fälle

a) Störung zeitlich konstant für $0 < t < t_a$ ($V(t) = 0, t > t_a$)



$$\Rightarrow \langle m^{(0)} | \hat{V}(t) | k^{(0)} \rangle \quad \text{zeitunabhängig im Intervall } 0 < t < t_a \quad !!$$

$$g_m^{(1)}(\epsilon) \underset{\substack{\uparrow \\ \text{für } t < t_a}}{=} \frac{1}{i\hbar} \langle m^{(0)} | \hat{V} | k^{(0)} \rangle \int_0^t dt' e^{i\frac{\epsilon}{\hbar}(E_m^{(0)} - E_k^{(0)})t'}$$

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

$$\text{führe ein: } \Omega = \frac{E_m^{(0)} - E_k^{(0)}}{\hbar} \quad \text{« Übergangsfrequenz »}$$

$$\Rightarrow |g_m^{(1)}(\epsilon)|^2 = |\langle m^{(0)} | \hat{V} | k^{(0)} \rangle|^2 \frac{1}{\hbar^2 \Omega^2} (e^{-i\Omega t} - 1)(e^{i\Omega t} - 1)$$

$$= |\langle \psi^{(0)} | \hat{V} | \psi^{(0)} \rangle|^2 \underbrace{\frac{1}{\hbar^2 \Omega^2} 4 \sin^2\left(\frac{\Omega}{2} t\right)}_{D_t(E_m - E_n^{(0)})}$$

$$D_t(E_m^{(0)} - E_n^{(0)})$$

Geirichtsfehler:

hängt ab von $\Omega \sim E_m^{(0)} - E_n^{(0)}$

und von der Zeit t !

Betrachte genau die Funktion $D_t(E)$ } Energie differenz!

- $E \rightarrow 0$ nutze $\sin x \approx x$ $\leftarrow x \rightarrow 0$
 $\Rightarrow \sin^2 x \approx x^2$

$$\Rightarrow D_t(E) \xrightarrow{E \rightarrow 0} \frac{1}{\hbar^2 \Omega^2} 4 \left(\frac{\Omega}{2}\right)^2 t^2 = \frac{t^2}{\hbar^2} \xrightarrow{t \rightarrow \infty} \infty \quad \text{Divergenz!}$$

- Betrachte das Integral

$$\int_{-\infty}^{\infty} dE D_t(E) = \int_{-\infty}^{\infty} dE \frac{4}{E^2} \sin^2\left(\frac{Et}{\hbar}\right)$$

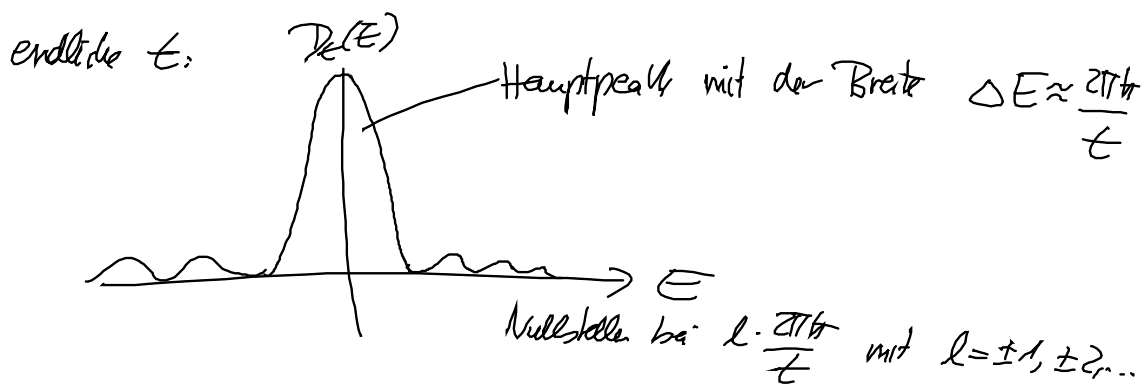
$$= \dots = \frac{2t}{\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} dy \frac{\sin^2 y}{y^2} = \frac{2t}{\hbar} \cdot \pi$$

$y = \frac{Et}{\hbar}$

$$\Rightarrow \frac{\hbar}{2\pi t} \int_{-\infty}^{\infty} dE D_t(E) = 1 \quad \text{unabhangig von der Zeit } t \text{ !!}$$

Dies impliziert (Zusammen mit dem vorherigen Ergebnis)

$$\frac{\hbar}{2\pi t} D_t(E) \xrightarrow{t \rightarrow \infty} d(E)$$



Folgerung fur die ubergangswahrscheinlichkeiten

$$W_{mk} = |\langle m^{(0)} | \psi(t) \rangle|^2 = \lambda^2 |g_m^{(0)}(E)|^2 \quad \text{1. Ordnung Stortheorie}$$

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

i) Fur $t < \infty$ hat der Hauptpeak von $D_t(E)$ eine Breite $\Delta E \approx \frac{\hbar}{2\pi t}$

⇒ Übergänge erfolgen bevorzugt zwischen Zuständen mit Energiedifferenz $E_m^{(0)} - E_n^{(0)}$ im Intervall ΔE .

(i) Für $t \rightarrow \infty$

$$W_{mk} \rightarrow \lambda^2 |\langle m^{(0)} | \vec{V} | k^{(0)} \rangle|^2 \frac{2\pi t}{\hbar} \delta(E_m^{(0)} - E_k^{(0)})$$

d.h. die Energie bleibt erhalten!
 $E_m^{(0)} = E_k^{(0)}$

Übergänge können also nur zwischen Zuständen zu entarteten Energieniveaus erfolgen!

Häufig betrachtet man statt der Übergangswahrsch. die Übergatsrate

$$\tilde{W}_{mk} = \frac{W_{mk}}{t} \approx \frac{2\pi}{\hbar} \lambda^2 |\langle m^{(0)} | \vec{V} | k^{(0)} \rangle|^2 \delta(E_m^{(0)} - E_k^{(0)})$$

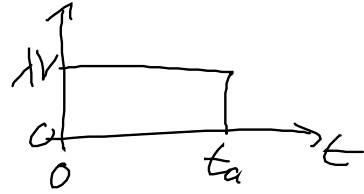
„Fermi's Goldene Regel“



Diskussion

i) Fermi's Golden Regel setzt voraus, dass $t \rightarrow \infty$!

Das impliziert aber auch, dass $t_a \rightarrow \infty$
(denn wir arbeiten im Bereich $0 < t < t_a$!!)



problematisch, denn ^{die Idee} Störperturbation ist
ja, dass die Störung klein ist. Sie sollte
also nicht unendlich lang wirken !!

Trotzdem funktioniert Fermi's Golden Regel häufig gut, denn de facto
bedeutet $t \rightarrow \infty$ bzw $t_a \rightarrow \infty$ nur "groß" im Vergleich
zur mikroskopischen Relaxationszeit (Abklingen von Einschwingvorgängen)

ii) Ebenfalls problematisch:

Auftauchen einer Delta-Funktion in den Ausdrücken für W_{fi} , \hat{H}_{int}

das kann man "reparieren" \rightarrow s. nächste VL !