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

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

Energie kein Erhaltungsgröße

$\Rightarrow$ Fokus auf Zeitentwicklung der Zustände

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

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

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

$\hat{H}_0 |n^{(0)}\rangle = E_n^{(0)} |n^{(0)}\rangle$

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

$$|\psi(t=0)\rangle \stackrel{!}{=} |k^{(0)}\rangle \Rightarrow c_n(t=0) = \delta_{nk}$$

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

Bemerkung:
Für das ungestörte System wissen wir:

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

$$\text{mit } c_n^{(0)}(t) = e^{-i/\hbar E_n^{(0)} t} \cdot \delta_{nk}$$

$$= e^{-i/\hbar E_k^{(0)} t} |k^{(0)}\rangle$$

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

$$c_n(t) \stackrel{!}{=} \underbrace{e^{-i/\hbar E_n^{(0)} t}}_{\substack{\text{Zeitentwicklung} \\ \text{des ungestörten} \\ \text{System (zur Energie } E_n^{(0)})}} \underbrace{g_n(t)}_{\text{Korrekturfaktor !}}$$

$\Rightarrow$ Umschreiben von (*) in eine Diff.gleichung für die Korrekturfaktoren $g_n(t)$!

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 (*)

$$\cancel{E_m^{(0)} c_m(t)} + i\hbar \frac{d}{dt} g_m(t)\, e^{-\frac{i}{\hbar} E_m^{(0)} t}$$

$$= \cancel{E_m^{(0)} c_m(t)} + \sum_n e^{-\frac{i}{\hbar} E_n^{(0)} t} g_n(t) \langle m^{(0)} | \hat{H}_1(t) | n^{(0)} \rangle$$

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

exakt !!

Satz von Diff.gleichungen erster Ordnung für die Korrekturfaktoren $g_n(t)$

Anfangsbedingung: $|\Psi(t=0)\rangle \overset{!}{=} |k^{(0)}\rangle$

$$\Leftrightarrow c_n(t=0) = \delta_{nk}$$

$t=0$!

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

$$= \delta_{nk}$$

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

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

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

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

Betrachte wieder getrennt die Gleichungen in der Ordnung λ^p

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

Konsistenz mit unseren Annahmen für das ungestörte System! ($\lambda = 0$)

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

mit $c_n^{(0)}(t) = e^{-\frac{i}{\hbar} E_n^{(0)} t}\, d_{nu}$

so daß $|\psi_0(t=0)\rangle = |k^{(0)}\rangle$

$$\Rightarrow g_m^{(0)}(t) = e^{\frac{i}{\hbar}E_m^{(0)}t}\, c_m^{(0)}(t)$$

$$= e^{\frac{i}{\hbar}(E_m^{(0)}-E_m^{(0)})t}\,\delta_{mk} = \delta_{mk}$$

Betrachte nun:

$\underline{\underline{p=1}}$

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

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

Diff.gleichung für den Koeffizientenfaktor in 1. Ordnung Störungstheorie !!

Erinnerung:

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

Formale Lösung für $m \neq k$

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

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

Anfangsbedingung!

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

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 (Störungsentwicklung von Koeffizienten)

Es geht auch eleganter!

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

Wir betrachten nun die sogenannte Übergangswahrscheinlichkeit

$\hat{=}$ Wahrsch., zur Zeit t den Zustand $|m^{(0)}\rangle$ zu finden, wenn das System zur 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 $\hat{H}_0$ allein bestimmt und kann daher nur in einem Eigenzustand von $\hat{H}_0$ sein!

Definition:

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

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

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

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

$$\Rightarrow w_{mk} = \left| \sum_n g_n(t) \underbrace{\langle m^{(0)} | n^{(0)} \rangle}_{\delta_{mn}} \right|^2 \underbrace{e^{-\frac{i}{\hbar} E_n^{(0)} t + \frac{i}{\hbar} E_0^{(0)} t}}_{1}$$

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

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

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

$$g_m(t) \approx \underbrace{g_m^{(0)}(t)}_{0,\ \text{da } m \neq k} + \lambda g_m^{(1)}(t) = \lambda g_m^{(1)}(t)$$

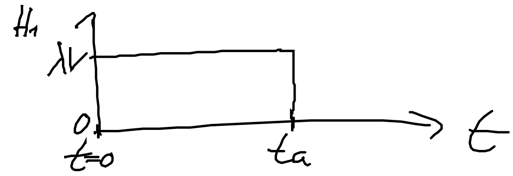
$$\Rightarrow \boxed{w_{mk} = \lambda^2 \left| g_m^{(1)}(t) \right|^2}$$

mit

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

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

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



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

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

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

führe ein: $\Omega = \dfrac{E_m^{(0)} - E_k^{(0)}}{\hbar}$ „Übergangsfrequenz"

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

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

Gewichtsfaktor:
hängt ab von $\Omega \sim E_m^{(0)} - E_n^{(0)}$
und von der Zeit t !

Betrachte genauer die Funktion $D_t(E)$ Energiedifferenz!

- $E \to 0$ nutze $\sin x \approx x$ ($x \to 0$)
  $\Rightarrow \sin^2 x \approx x^2$

$$\Rightarrow D_t(E) \xrightarrow[E\to 0]{} \frac{1}{\hbar^2\Omega^2} 4\left(\frac{\Omega}{2}\right)^2 t^2$$

$$= \frac{t^2}{\hbar^2} \xrightarrow[t\to\infty]{} \infty \quad \text{Divergenz!}$$

- Betrachte das Integral

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

$y = \frac{Et}{2\hbar}$

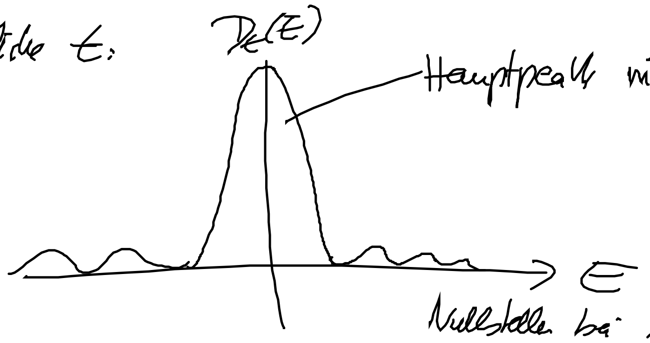
$$= \ldots = \frac{2t}{\hbar} \underbrace{\int_{-\infty}^{\infty} dy\, \frac{\sin^2 y}{y^2}}_{\pi} = \frac{2t}{\hbar} \cdot \pi$$

$$\Rightarrow \frac{\hbar}{2\pi t} \int_{-\infty}^{\infty} dE\, D_t(E) = 1$$ unabhängig von der Zeit t !!

Das impliziert (zusammen mit dem vorherigen Ergebnis)

$$\frac{\hbar}{2\pi t} D_t(E) \xrightarrow[t\to\infty]{} \delta(E)$$

endliche t:



Hauptpeak mit der Breite $\Delta E \approx \frac{2\pi\hbar}{t}$

Nullstellen bei $l \cdot \frac{2\pi\hbar}{t}$ mit $l = \pm 1, \pm 2, \ldots$

Folgerungen für die Übergangswahrscheinlichkeiten

$$W_{mk} = |\langle m^{(0)} | \psi(t) \rangle|^2 = \underbrace{\lambda^2 |g_m^{(1)}(t)|^2}_{\text{1. Ordnung Störungstheorie}}$$

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

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

$\Rightarrow$ Übergänge erfolgen bevorzugt zwischen Zuständen mit Energiedifferenz $E_m^{(0)} - E_k^{(0)}$ im Intervall ΔE!!

ii) Für $t \to \infty$

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

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

Übergänge können also nur zwischen Zuständen zu entarteten Energieniveau erfolgen!

Häufig betrachtet man statt der Übergangswahrsch. die Übergangsrate

$$\boxed{\hat{w}_{mk} = \frac{w_{mk}}{t} \approx \frac{2\pi}{\hbar} \lambda^2 |\langle m^{(0)} | \hat{V} | k^{(0)} \rangle|^2 \delta(E_m^{(0)} - E_k^{(0)})}$$

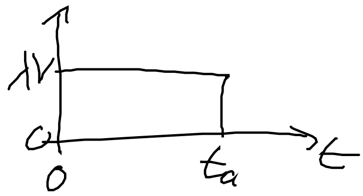
„Fermi's Goldene Regel"

Diskussion

i) Fermi's Goldene Regel setzt voraus, dass $t \to \infty$!

Das impliziert aber auch, dass $t_a \to \infty$

(denn wir arbeiten im Bereich $0 < t < t_a$!!)



problematisch, denn die Idee der Störungstheorie ist ja, dass die Störung klein ist. Sie sollte also nicht unendlich lang wirken !!

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

ii) Ebenfalls problematisch:

Auftauchen einer Delta-Funktion in den Ausdrücken für W_{nm}, $\tilde{W}_{nm}$

das kann man „reparieren" $\Rightarrow$ s. nächste VL !