

$$\hat{G}(z) = (z - \hat{H})^{-1}, \quad z = E \pm i\epsilon, \quad \hat{G}_0(z) = (z - \hat{H}_0)^{-1}$$

voller Green'sche Operator

$$\text{Dyson-Gl: } \hat{G} = \hat{G}_0 + \hat{G}_0 \hat{V} \hat{G}$$

Lippmann-Schwinger-Gl.

$$|\psi_{\underline{k}}^{(\pm)}\rangle = |\underline{k}\rangle + \hat{G}_0^{(\pm)}(E) \hat{V} |\psi_{\underline{k}}^{(\pm)}\rangle$$

$$\text{"T-Matrix": } \hat{T}(z) = \hat{V} + \hat{T}(z) \hat{G}_0(z) \hat{V}$$

$$= |\underline{k}\rangle + \hat{G}_0^{(\pm)}(E) \hat{V} |\underline{k}\rangle$$

exakt!

(iterieren)

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

Behandle dies als Stör-Terme im Streugenerator \hat{V} !

$$\text{Streuamplitude: } f^{(\pm)}(\underline{k}_{er}, \underline{k}) = \frac{-m}{2\pi\hbar^2} \langle \underline{k}_{er} | \hat{T}^{(\pm)}(E) | \underline{k} \rangle \quad \text{exakt}$$

$$\text{Born'sche Näherung: } f_{\text{Born}}^{(\pm)}(\underline{k}_{er}, \underline{k}) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \langle \underline{k}_{er} | \hat{V} | \underline{k} \rangle$$

III.5. Zeitabhängige Störungstheorie

→ Beschreibung zeitabhängiger Streuvorgänge, Übergangswahrscheinlichkeiten

$$\text{Ausgangspunkt: Zeitabhängige SG: } i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle = \hat{H} |\psi(t)\rangle$$

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

Zustandentwicklungsoperator (unitär)
"Propagator"

\hat{H} nicht explizit zeitabhängig:

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

nicht explizit zeitabhängig, $\hat{H}_0 = \frac{\hat{p}^2}{2m}$

$$\text{Sei jetzt: } \hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}(t)$$

Bauke Wechselwirkungsbild (Dirac-Bild) der Dynamik (Wiederholung)

$$\text{Operatoren: } \hat{A}_D(t) = e^{i\frac{t}{\hbar} \hat{H}_0} \hat{A}_S e^{-i\frac{t}{\hbar} \hat{H}_0}, \quad |\psi_D(t)\rangle = e^{i\frac{t}{\hbar} \hat{H}_0} |\psi_S(t)\rangle$$

Dirac Schrödinger Schrödinger

Zeitabhängigkeit der Dirac-Zustände:

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\psi_D(t)\rangle = \hat{V}_D(t) |\psi_D(t)\rangle, \quad \hat{V}_D = e^{i\frac{t}{\hbar} \hat{H}_0} \hat{V} e^{-i\frac{t}{\hbar} \hat{H}_0}$$

Störung!

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

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

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

Betrachte (*). Formale Darstellung von $\hat{U}_D(t, t_0)$ durch Integration und Iteration von (*)

aus (*): $\hat{U}_D(t, t_0) = \underbrace{\hat{U}_D(t_0, t_0)}_1 - i \int_{t_0}^t dt_1 \hat{V}_D(t_1) \hat{U}_D(t_1, t_0)$

$$\hat{U}_D(t_0, t_0) = e^{-i\hat{H}_0(t_0-t_0)} \underbrace{\hat{U}(t_0, t_0)}_1 e^{+i\hat{H}_0(t_0-t_0)} = 1$$

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

Iteration

$$= 1 - i \int_{t_0}^t dt_1 \hat{V}_D(t_1) + (-i)^2 \int_{t_0}^t dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 \hat{V}_D(t_1) \hat{V}_D(t_2) + \dots$$

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

Entwicklung in Potenzen von \hat{V} (Störpotential)

III. 5.1. Zeitunabhängiges Potential

(physikalisch: Störw. wirkt über einen Bereich, aber dennoch endlichen Zeitbereich)

also $\hat{V}(t) = \hat{V} = \text{const}$
Schrödingerbild

Betrachte für diesen Fall die Integranden in (**)

$$(n=1) \quad \hat{V}_D(t_1) = e^{i\frac{\hbar}{\hbar} H_0 t_1} \hat{V} e^{-i\frac{\hbar}{\hbar} H_0 t_1}$$

$$(n=2) \quad \hat{V}_D(t_1) \hat{V}_D(t_2) = e^{i\frac{\hbar}{\hbar} H_0 t_1} \hat{V} \underbrace{e^{-i\frac{\hbar}{\hbar} H_0 t_1} e^{i\frac{\hbar}{\hbar} H_0 t_2}}_{e^{-i\frac{\hbar}{\hbar} H_0 (t_1 - t_2)}} \hat{V} e^{-i\frac{\hbar}{\hbar} H_0 t_2}$$

(n=3) ...

Beachte auch: in den Integralen in (***) ist $t_2 \leq t_1$, $t_3 \leq t_2$...

Das können wir formal durch drei Einführung von Stufenfunktionen beschreiben

$$\text{z.B. } n=2: \quad I = (-i)^2 \int_{t_0}^t dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 \hat{V}_D(t_1) \hat{V}_D(t_2)$$

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

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

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

$$(n=2) \Rightarrow I = -i \int_{t_0}^t dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 e^{i\frac{\hbar}{\hbar} H_0 t_1} \hat{V} \hat{G}_0^+(t_1 - t_2) \hat{V} e^{-i\frac{\hbar}{\hbar} H_0 t_2}$$

Die Funktion $\hat{G}_0^+(t)$ hat einen engen Bezug zur Funktion $\hat{G}_0^+(\epsilon)$ in der Zeitunabhängigen Störungstheorie (Vgl. III.3. III.4)

Betrachte dazu die Fouriertransformiert

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

$$\text{mit } \hat{G}_0^+(\omega) = \frac{1}{\omega + i\epsilon - \frac{\hbar}{\hbar}} \quad (\epsilon \rightarrow 0)$$

(hier ohne Beweis)

Das ist formal identisch zu unserer Def. des freien Green'schen Operators

$$\hat{G}_0^+(E) = \frac{1}{E - \hat{H}_0 + i\epsilon}, \quad \epsilon \rightarrow 0 \quad (\epsilon = \text{brw.}!)$$

Zurück zu Gleichung (***) für den Zeitentwicklungsoperator

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

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

(***)

$$- i \int_{t_0}^t dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 \int_{t_0}^{t_2} dt_3 e^{i\hat{H}_0(t-t_1)} \hat{V} \hat{G}_0^+(t_1, t_2) \hat{V} \hat{G}_0^+(t_2, t_3) \hat{V} e^{-i\hat{H}_0(t-t_3)}$$

+ ...

Berechnet nun Matrixelement der Form $\langle m | \hat{U}_D(t, t_0) | n \rangle$

mit $|m\rangle, |n\rangle$ Eigenzustände von \hat{H}_0

$$\text{also } \hat{H}_0 |m\rangle = E_m |m\rangle$$

$$e^{i\hat{H}_0(t-t_0)} |m\rangle = e^{iE_m(t-t_0)} |m\rangle$$

Idee dahinter:

Die Störung \hat{V} wird erst zu einem best. Zeitpunkt t_0 "eingeschaltet"

Vor diesem Zeitpunkt befand sich das System im Eigenzustand $|n\rangle$ von \hat{H}_0

Die Störung wirkt über einen endlichen Zeitraum

Frage: Was ist die Wahrscheinl., dass ~~ist~~ sich das Teilchen nach der Störung in einem anderen Eigenzustand $|n\rangle$ von \hat{H}_0 befindet?

Antwort: Übergangswahrscheinlichkeit

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

Zustand zu Zeit t im Diac-Bild!

Aus (*)

$$\langle m | \hat{U}_D(t, t_0) | n \rangle = \langle m | n \rangle -i \int_{t_0}^t dt_1 e^{i \frac{1}{\hbar} (E_m - E_n) t_1} \langle m | \hat{V} | n \rangle$$

$$-i \int_{t_0}^t dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 e^{i \frac{1}{\hbar} E_m t_1} \langle m | \hat{V} \hat{G}_0^+(t_1 - t_2) \hat{V} | n \rangle e^{-i \frac{1}{\hbar} E_n t_2}$$

$-i \sqrt{\dots}$... in den Integranden werden immer Matrixelemente von Produkten der Form $\hat{V} \hat{G}_0^+ \hat{V} \hat{G}_0^+ \hat{V} \dots$ auf

allerersten Term: $\langle n | n \rangle = \delta_{nn}$ (Zustände orthogonal)

drifter Term, höhere Terme: ersetze $\hat{G}_0^+(t)$ durch Fouriertransformiert

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

$$\Rightarrow \langle m | \hat{U}_D(t, t_0) | n \rangle = \delta_{nm} -i \int_{t_0}^t dt_1 e^{i \frac{1}{\hbar} (E_m - E_n) t_1} \langle m | \hat{V} | n \rangle$$

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

$-i \dots$

(z.B. Teil 3. Ordng: drei Integrale über die Zeite t_1, t_2, t_3
 zwei " über die Frequenzen ω_1, ω_2)
 un.w.

Vereinfachung des Integrals durch Betrachtung des Grenzfalles.

$$t_0 \rightarrow -\infty, t \rightarrow \infty$$

\Rightarrow alle Zeitintegrale in $\langle m | \hat{U}_D | n \rangle$ werden zu Integralen von $-\infty$ bis $+\infty$!

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

$$\text{und } \int d\omega \delta\left(\frac{E_m}{\hbar} - \omega\right) \delta\left(\frac{E_n}{\hbar} - \omega\right) f(\omega) = \delta\left(\frac{E_m}{\hbar} - \frac{E_n}{\hbar}\right) f\left(\frac{E_m}{\hbar}\right)$$

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

$$\boxed{\omega = \frac{E}{\hbar} !}$$

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

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

- i ...

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

bekannt:

entspricht gerade dem in Kap III. 4.
 eingeführten T-Matrix!

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

$$\text{mit } \hat{T}^+(E_n) = \hat{T}(E_n + i\epsilon), \epsilon \rightarrow 0$$

Formal exakt!

Definition: Die oben betrachteten Matrixelemente werden in Zukunft als Elemente der S-Matrix bezeichnet.

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

Bemerkungen

• Physikalische Bedeutung: Das Betragsquadrat $|S_{mn}|^2$ entspricht dem asymptotischen Übergangswahrscheinlichkeit von Anfangszustand $|n\rangle$ in den Zustand $|m\rangle$ (beides Eigenzustände von \hat{H}_0)

• Erster Term (δ_{mn}): relevant, falls $|m\rangle = |n\rangle$

Im Sinne der Streutheorie entspricht dies dem Betrag des durchgehenden Anteils der Welle

• Zweiter Term: ($\sim \delta(E_m - E_n)$)

Dieser drückt Energieerhaltung aus! Also elastische Streuung
Das geht nur dann, wenn das Energieniveau unentartet ist

• Die Größe von S_{mn} (bzw. Stärke der Streuung) wird durch die T-Matrix $\hat{T}^+(\epsilon)$ bestimmt

$\Rightarrow \hat{T}$ hat zentrale Bedeutung!

(wie auch für die Streuamplitude)

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

Erweiterung: $\hat{T} = \hat{V} + \hat{T} \hat{G}_0 \hat{V}$ exakt

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

Ausgangspunkt für Näherungen!