18. Zeitabhängige Störungsrechnung (→ Emission + Absorption eines elmag. F.)

Schrödinger Bild

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\psi_s(t)\rangle = (H_{0_{(S)}} + \lambda H_s') |\psi_s(t)\rangle \qquad \text{"}\lambda \ll 1\text{"}$$

18.1 Wechselwirkungs-Bild (Dirac-Bild)

"interaction picture"

$$|\psi_I(t)\rangle = \underbrace{e^{i/\hbar H_{0_s} t}}_{U_{0_s}^{-1}(t)} |\psi_s(t)\rangle$$

V_s im Schrödinger-Bild!

$$\rightarrow \; i\hbar \frac{d}{dt} |\psi_I(t)\rangle = U_{0_s}^{-1}(t) \left(\cancel{-H_{0_s}} \cancel{+H_{0_s}} + \lambda \underbrace{H_s'}_{V_s}\right) \underbrace{|\psi_s(t)\rangle}_{U_{0_s}(t) U_{0_s}^{-1}(t)}$$

$$U_{0_s}^{-1}(t) H_s' U_{0_s}(t) = H_I'$$

allgem. $\langle\psi_s | O_s | \psi_s\rangle = \langle \psi_I | \underbrace{U_{0_s}^{-1}(t)\, O_s\, U_{0_s}}_{O_I} |\psi_I\rangle$!

$$\rightarrow \; \boxed{i\hbar \frac{d}{dt} |\psi_I(t)\rangle = \lambda H_I' |\psi_I(t)\rangle} \qquad (*)$$

$|\psi_I(t)\rangle$ ändert sich zeitlich nur durch die Störung H'!

$$\boxed{\frac{d}{dt} O_I(t) = \frac{i}{\hbar} [\underbrace{H_{0_I}}_{= H_{0_s} = H_0}, O_I(t)]} \quad \text{für zeitunabh. } O_s$$

(sonst $+ U_0^{-1} \frac{d}{dt} O_s U_0$)

$\underline{H_0}$ gibt: zeitliche Abhängigkeit von O_I

18.2 Integration der neuen Schrödinger-Gl.

$$|\psi_I(t)\rangle = |\psi_I(t_0)\rangle + \underbrace{\frac{\lambda}{i\hbar}\int_{t_0}^{t} dt'}_{\text{"klein"}}\, H_I'(t')\,|\psi_I(t')\rangle$$

Integralgleichung

Lösung durch Neumann'sche Reihe (Iteration)

$$|\psi_I(t)\rangle = |\psi_I(t_0)\rangle + \frac{\lambda}{i\hbar}\int_{t_0}^{t} dt'\, H_I'(t')\,|\psi_I(t_0)\rangle$$

$$+ \frac{\lambda^2}{(i\hbar)^2}\int_0^{t} dt' \int_0^{t'} dt''\, \underbrace{H_I'(t')\, H_I'(t'')}_{\text{"zeitgeordnet"!}}\,|\psi_I(t_0)\rangle$$

$$+ \ldots$$

⇝ Basis weiterer Entwicklungen (~ QFT) → 104'

in zeitunabhängiger Basis $\quad H_{0_S}|n\rangle = E_n|n\rangle$

$$|\psi_I(t)\rangle = \sum_n |n\rangle \underbrace{\langle n|\psi_I(t)\rangle}_{a_n(t)}$$

in ⊛ p. 131

$$i\hbar\, \dot a_n(t) = \sum_{n'} \lambda\, H'_{I\,nn'}\, a_{n'}(t)$$

mit Anfangsbed. $\quad a_n(t_0) = \delta_{n\bar n}$

Falls Analytizität in λ: Neumann'sche Reihe, um für $a_n(t)$ zur Lösung

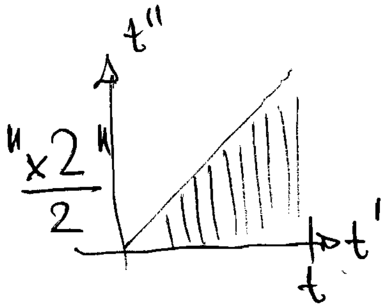
$$a_n(t) = \underbrace{a_n(t_0)}_{a_n^{(0)} = \delta_{n\bar n}} + \lambda\, a_n^{(1)} + \ldots$$

zeitunabhängig: $\dot a_n^{(0)} = 0$

zusammenfassend

$$|\psi_I(t)\rangle = T \exp\left\{ \frac{\lambda}{i\hbar} \int_{t_0}^{t} dt' \, H_I'(t') \right\} |\psi_I(t_0))$$

„Zeitordnung"



und

$$a_n(t) = \left[T \exp\left\{ \frac{\lambda}{i\hbar} \int_{t_0}^{t} H_I'(t')\, dt' \right\} \right]_{nn'} a_{n'}(t_0)$$

entwickle dann nach λ

λ^1

$$i\hbar\,\dot{a}_n^{(1)} = \sum_{n'} (H_I')_{nn'}\,\underbrace{\delta_{n'\bar{n}}}_{a_{n'}(t_0)} = (H_I')_{n\bar{n}}$$

$$\boxed{a_n^{(1)}(t) = \frac{1}{i\hbar}\int_{t_0}^{t} (H_I'(t'))_{n\bar{n}}\,dt'}$$

mit Anfangsbed. $a_n^{(1)}(t_0) = 0$

Fallunterscheidung

18.3 H_S' sei nicht explizit zeitabhängig

$$(H_I')_{n\bar{n}} = \langle n|\,e^{i/\hbar H_0 t}\,H_S'\,e^{-i/\hbar H_0 t}\,|\bar{n}\rangle$$

$$= \underbrace{e^{i/\hbar (E_n - E_{\bar{n}})t}}_{e^{i\omega_{n\bar{n}}t}}\;\underbrace{\langle n|\,H_S'\,|\bar{n}\rangle}_{\text{zeitunabhängig}}$$

$$a_n^{(1)}(t) = \frac{1}{i\hbar}(H_s')_{n\bar{n}}\int_{t_0}^{t} e^{i\omega_{n\bar{n}}t'}\,dt'$$

$$\begin{cases} \dfrac{e^{i\omega_{n\bar{n}}(t-t_0)} - 1}{i\omega_{n\bar{n}}} & n \neq \bar{n} \\ (t - t_0) & n = \bar{n} \end{cases}$$

Übergangswahrscheinlichkeit in $n \neq \bar{n}$ bis zur Zeit t

$$\lambda^2\,|a_n^{(1)}(t)|^2 = \left|\frac{\lambda H'_{n\bar{n}}}{\hbar}\right|^2 \frac{1}{\omega_{n\bar{n}}^2}\,4\sin^2\!\left(\frac{\omega_{n\bar{n}}(t-t_0)}{2}\right)\quad (n \neq \bar{n})$$

in der Zeiteinheit

$$\lambda^2 \frac{d}{dt}|a_n^{(1)}(t)|^2 = \left|\frac{\lambda H'_{n\bar{n}}}{\hbar}\right|^2 \frac{1}{\omega_{n\bar{n}}}\,2\sin\omega_{n\bar{n}}(t-t_0)$$

mit kontinuierlichem Spektrum $n \to E, r \leftarrow$ Entartung

(bzw. dichte Termfolge!)

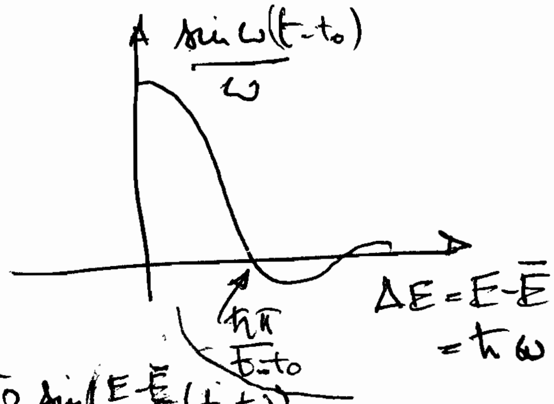
$$\sum_{n \in I(n)} \frac{d}{dt} |a_n^{(1)}(t)|^2 \to \sum_r \int dE \underset{\substack{\uparrow \\ \text{Termdichte}}}{\rho_r(E)} \frac{d}{dt} |a_{E,r}^{(1)}(t)|^2$$

① Vollständigkeit: $\sum_r \int dE \, \rho_r(E) \, |\phi_{E,r}\rangle\langle\phi_{E,r}| = \mathbb{1}_{op.}$

② Orthog. $\langle\phi_{E,r}|\phi_{E',r'}\rangle = \delta_{rr'}\,\delta(E-E')\,N_r(E)$

(konsistent ① mit ② / mult. ① mit $\langle\phi_{\bar{E},\bar{r}}|$)

$$\rho_r(E) = (N_r(E))^{-1}$$



$$\frac{\sin\omega(t-t_0)}{\omega} \xrightarrow[t\to\infty]{} \pi\,\delta(\omega)$$

$$\sum_{r\neq\bar{r}} \int \frac{dE}{\hbar} \rho_r(E) \, |\lambda H'_{E,r;\bar{E},\bar{r}}|^2 \frac{2\sin\left(\frac{E-\bar{E}}{\hbar}(t-t_0)\right)}{(E-\bar{E})/\hbar}$$

$E \sim \bar{E}$!

$$\approx \sum_{r\neq\bar{r}} |\lambda H'_{E,r;\bar{E},\bar{r}}|^2 \rho_r(E)\Big|_{E=\bar{E}} \frac{2}{\hbar} \underbrace{\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dE}{\hbar} \frac{\sin\left(\frac{E-\bar{E}}{\hbar}\right)(t-t_0)}{\frac{E-\bar{E}}{\hbar}}}_{\to\pi}$$

Übergangswahrscheinlichkeit ("golden rule" von Fermi)

$$\boxed{\frac{2\pi}{\hbar} \sum_{r\neq\bar{r}} |\lambda H'_{\bar{E}\bar{r},\bar{E},r}|^2 \rho_r(\bar{E})}$$

d.h. $t-t_0$ groß, aber nicht zu groß

• Bedingung f. Störungsrechnung: (grob!) $\left|\frac{\lambda(t-t_0)\,H'_{n\bar{n}}}{\hbar}\right| \ll 1$

• $\boxed{\Delta E \gg \frac{\pi \hbar}{|t-t_0|}}$ (s. obige Abb.) für Appr. $\delta(\omega)$!

18.4 zeitabhängige Störung H'

$$H_S' = \underbrace{h(\omega)}_{\text{zeitunabhängig}} e^{-i\omega t} + h^*(\omega) e^{i\omega t}$$

$$a_n^{(1)}(t) = \frac{1}{i\hbar}\Big\{ h_{n\bar n} \int_{t_0}^{t} e^{i(\omega_{n\bar n}-\omega)(t'-t_0)}\,dt' + h^*_{n\bar n} \text{ c.c.} \Big\}$$

$a_n(t_0) = \delta_{n\bar n}$, $a_n^{(1)}(t_0) = 0$ Anfangsbed.

$$\sim \frac{d}{dt}\left|a_n^{(1)}(t)\right|^2 = \frac{2}{\hbar}|h_{n\bar n}|^2 \frac{\sin((\omega_{n\bar n}-\omega)(t-t_0))}{\hbar(\omega_{n\bar n}-\omega)}$$

Linienbreite $\hbar\pi/(t-t_0)$

$$+ \frac{2}{\hbar}|h^*_{n\bar n}|^2 \frac{\sin((\omega_{n\bar n}+\omega)(t-t_0))}{\hbar(\omega_{n\bar n}+\omega)}$$

+ Interferenzterme

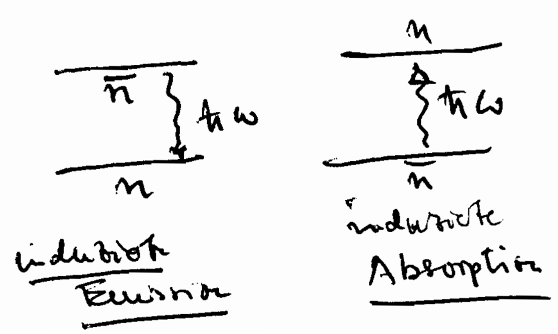
$$\rightarrow W_{n\bar n} = \frac{2\pi}{\hbar}|h_{n\bar n}|^2 (\rho_n)\, \delta(E_n - E_{\bar n} + \hbar\omega)$$ Abgabe von Energie

$$+ \frac{2\pi}{\hbar}|h^*_{n\bar n}|^2 (\rho_n)\, \delta(E_n - E_{\bar n} - \hbar\omega)$$ Aufnahme von Energie

(Interferenzterm geht für $t \to \infty$ weg!)

Emission / Absorption

z.B. induzierte Emission + Absorption von el.-mag. Wellen (Licht)



$$H = \frac{(\vec{p} - \frac{e}{c}\vec{A})^2}{2m} + V$$ (13

in Coulomb-Eichung $\vec{\nabla} \cdot \vec{A} = 0$ mit $\vec{A} = \mathrm{Re}\left(\vec{A}_0 \, e^{i\vec{k}\vec{x} - i\omega t}\right)$

$\sim \vec{k} \cdot \vec{A}_0 = 0$

$$H \sim \frac{\vec{p}^2}{2m} + V - \frac{e}{2mc}(2\vec{A} \cdot \vec{p})$$

später QED...

kein quantisiertes Feld!

$A(X)$ mit $X = X_{op}$!

$$H' = -\frac{e}{mc}\vec{A} \cdot \vec{P}_{op}$$

Stellung egal

$$= \frac{e}{2mc}\left\{\vec{A}_0 \cdot \vec{P}_{op} e^{i(\vec{k}\vec{x} - i\omega t)} + \vec{A}_0^* \cdot \vec{P}_{op} e^{-i(\vec{k}\vec{x}) + i\omega t}\right\}$$

$$h = -\frac{e}{2mc}\vec{A}_0 \, e^{i\vec{k}\vec{x}} \cdot \vec{p}_{op}$$

$$\left([\vec{P}_{op}, e^{i\vec{k}\vec{x}}] = \frac{\hbar}{i}\vec{\nabla}_x e^{i\vec{k}\vec{x}} = \hbar\vec{k}\, e^{i\vec{k}\vec{x}} \to 0 \text{ da } \vec{k} \cdot \vec{A}_0 = 0 \right.$$

Intensitätliche Ausbildung in Bereich ω – $\omega + \delta\omega$

sei $i(\omega) = \frac{dI}{d\omega}$ (Integral über ω!

$$\sim \boxed{W_{n\bar{n}} = (2\pi)^2 \left(\frac{e^2}{\hbar c}\right) \frac{1}{\hbar\, \omega_{n\bar{n}}^2 m^2} \left|\left(e^{i\vec{k}\vec{x}} \hat{A}_0 \cdot \vec{P}\right)_{n\bar{n}}\right|^2 \begin{cases} i(\omega_{n\bar{n}}) \\ i(-\omega_{n\bar{n}}) \end{cases}}$$

$\alpha_{\text{Sommerf.}} = \frac{1}{137}$

Polarisations-Einheitsvektor

$$\left(\bar{S}_{\text{POINTING}} = \frac{c}{4\pi}\overline{\vec{E}^2} = \frac{c}{4\pi}\frac{1}{2}|\vec{E}_{\text{komplex}}|^2 = \frac{\omega^2}{8\pi c}|\vec{A}_0|^2 = i(\omega) \right)$$

es ist also $(e^{i\vec{k}\vec{x}} \hat{A}_0 \vec{P})_{n\bar{n}}$ auszuwerten

Ortsdarstellung

$$\int d^3x \; \psi_n^*(\vec{x})\, e^{i\vec{k}\vec{x}}\, \frac{\hbar}{i} \hat{A}_0 \cdot \vec{\nabla}\, \psi_{\bar{n}}(x)$$

$\vec{k}\cdot\vec{x}$: $\left.\begin{array}{l} |\vec{x}| \sim R \text{ v. Wellenfunktion} \\ k \approx \frac{2\pi}{\lambda} \end{array}\right\}$ $\underbrace{e^{i\vec{k}\cdot\vec{x}} \sim 1}_{\text{„}\lambda \text{ groß“}}$ Dipolnäherung

$$(\vec{P})_{n\bar{n}} = \frac{im}{\hbar}\left[H_0, \vec{x}\right]_{n\bar{n}} = \frac{im}{\hbar}\left(E_n \vec{X}_{n\bar{n}} - E_{\bar{n}} \vec{X}_{n\bar{n}}\right)$$

$$= i m\, \omega_{n\bar{n}}\, \vec{X}_{n\bar{n}}$$

$$\int \psi_n^*(x)\, e\vec{x}\, \psi_n(x)\, d^3x = \vec{D}_{n\bar{n}}$$ elektrische Dipolübergänge

---

system. Entwicklung $\rightsquigarrow$ Quadrupolübergänge ... etc.

$\sim$ Gruppentheorie ..

$\rightarrow$ Auswahlregeln

18.5 Auswahlregeln (Dipol: "E1 Übergänge")

α) Parität (Raumspiegelungen $\vec{x} \to -\vec{x}$)

$$\Pi^{-1} \vec{x} \, \Pi = -\vec{x} \qquad \Pi = \Pi^{+} = \Pi^{-1} \quad (\Pi^2 = \mathbb{1})$$

unitärer Op.

$$\langle \phi_\alpha | \vec{x} | \phi_{\bar{\alpha}} \rangle = - \langle \phi_\alpha | \Pi^{-1} \vec{x} \, \Pi | \phi_{\bar{\alpha}} \rangle$$

$$= - \langle \Pi \phi_\alpha | \vec{x} | \Pi \phi_{\bar{\alpha}} \rangle$$

$[H_0, \Pi] = 0 \;\rightsquigarrow$ simult. E.V. $\quad \Pi | \phi_\alpha \rangle = \pi_\alpha | \phi_\alpha \rangle$

$\pi_\alpha = \pm 1$

$\rightsquigarrow \quad \underline{\pi_\alpha = - \pi_{\bar{\alpha}}}$!

$$\underline{\Pi | \phi_{l,m} \rangle = (-1)^l | \phi_{l,m} \rangle}$$

β) <u>Drehungen</u>

→ Wigner-Eckart-Theorem (analog: mit $\vec{X}_{op}$ u. s. o.)

$$\langle \alpha, l, m | p_{m'} | \beta, l'', m'' \rangle = \langle l, m | 1, m'; l'', m'' \rangle \frac{1}{\sqrt{2l+1}} \langle \alpha, l \| p \| \beta, l'' \rangle$$

↑ sphärische Koord.

$p_{\pm 1} = \mp \frac{1}{\sqrt{2}} (p_x \pm i p_y)$ zirkulare Polarisation

$p_0 = p_z$ longitudinale Pol.

$$\left\{ \begin{array}{l} m = m' + m'' \\ l = l''+1, \; l'', \; l''-1 \quad (l'' \neq 0) \end{array} \right.$$

$\Delta l = \pm 1$ wegen Parität

$l = 1$ für $l'' = 0$ ($l = 0 \to l = 0$ verboten)

(139)

bei allgemeinem j (einfach i.s.c. Bahndrehimpuls):

$$\left\{\begin{array}{l} \Delta j = \pm 1, 0 \qquad (0 \to 0 \text{ verboten}) \\ \Delta m_j = m' \\ \text{Paritätswechsel} \qquad (\to \underline{\text{nicht}}\ \Delta \ell = 0) \end{array}\right.$$

<u>höhere Näherungen</u> (Quadrupol etc.)

$$e^{i\vec{k}\vec{x}} = 1 + i\vec{k}\cdot\vec{x} + \dots$$

$$\langle \alpha, \ell, m \,|\, i(\vec{k}\cdot\vec{x})\ \vec{A}_0\cdot\vec{p} \,|\, \beta, \ell'' m'' \rangle$$

$$= \sum_{i,j} i k_i A_{0j} \langle \alpha, \ell, m \,|\, \underbrace{x_i\, p_j} \,|\, \beta, \ell'', m'' \rangle$$

$$= \underbrace{\tfrac{1}{2}(x_i p_j + x_j p_i)} + \overbrace{\tfrac{1}{2}(x_i p_j - x_j p_i)}^{T^{(1)}_{m'},\ \text{axiales V.}}$$

im 2. Stufe $T^{(2)}_{m'} \,\|\, \frac{1}{2}(x_i p_j + x_j p_i) - \frac{1}{3}\delta_{ij}\sum_n x_n p_n$

$+$ Skalar $T^{(0)} \,\{\, + \frac{1}{3}\delta_{ij}\sum_n x_n p_n$

<u>$T^{(2)}$</u>

$$m = m' + m'' \qquad (\ = -2, \dots +2)$$

$$\ell = \ell''+2,\ \ell''+1,\ \ell'',\ (\ell''-1)\ (\ell''-2)$$

$$(0 \to 0,\ 1 \to 0,\ 0 \to 1 \text{ verboten})$$

Parität von $x_i p_i$: $+1$ $\to$ $\Delta \ell = \pm 1$ verboten!

"elektrische Quadrupolübergänge" (E2)

$\underline{T^{(1)}}$

$\Delta l = 0, \pm 1$ $\Delta m = m'$ $(0 \to 0$ verboten$)$

Parität $\underline{+1}$ $\to \Delta l = \pm 1$ verboten

magnetische Dipolübergänge M1

$\underline{T^{(0)}}$ liefert nichts wegen $\vec{k} \cdot \vec{A}_0 = 0$ (transversale Welle)

Bem. spontane Emission

$$\bar{n} \to n + \gamma$$

Ww. mit Quantenfeld (nicht das bisherige klassische Feld $\vec{A}(X_{op}, t)$!)

$\rightsquigarrow$ Quanten-Elektrodynamik (QED)

19. WKB Näherung, quasiklassische Näherung des Pfadintegrals