Wh:

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

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

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

Übergangswahrsch.

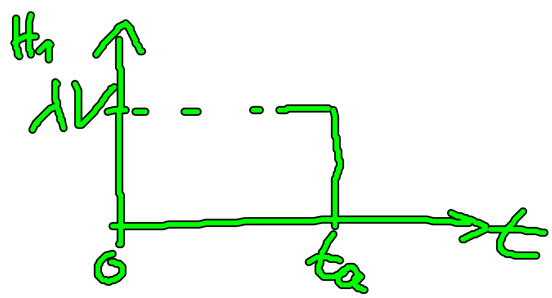
$$w_{mk} = |\langle m^{(0)}|\psi(t)\rangle|^2$$

besonders interessant

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

Auswertung von w_{mk} für 2 Fälle

a) Störung ist zeitlich konstant im einem Zeitintervall $0 \le t \le t_a$



$\to$ $\langle m^{(0)}|\hat{V}(t)|k^{(0)}\rangle$ ist in diesem Intervall zeitunabhängig

$$\Rightarrow g_m^{(1)}(t) \underset{\substack{\uparrow \\ t \ll t_a}}{\approx} \frac{1}{i\hbar}\langle m^{(0)}|\hat{V}|k^{(0)}\rangle \int_0^t dt'\, e^{\frac{i}{\hbar}(E_m^{(0)}-E_k^{(0)})t'}$$

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

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

$$\Rightarrow |g_m^{(1)}(t)|^2 = |\langle m^{(0)}|\hat{V}|k^{(0)}\rangle|^2 \cdot \frac{1}{\hbar^2\Omega^2}\underbrace{(e^{-i\Omega t}-1)(e^{+i\Omega t}-1)}_{\substack{1+e^{-i\Omega t}-e^{i\Omega t}+1 = 2-2\cos\Omega t \\ = 4\sin^2(\frac{\Omega}{2}t)}}$$

$$\Rightarrow \underbrace{|g_m^{(1)}(t)|^2}_{\lambda^{-2} w_{mk}} = |\langle m^{(0)}|\hat{V}|k^{(0)}\rangle|^2 \cdot \underbrace{\frac{1}{\hbar^2\Omega^2}4\sin^2(\frac{\Omega}{2}t)}_{D_t(E_m^{(0)}-E_k^{(0)}) = D_t(\Omega)}$$

„Gewichtsfaktor"

$\boxed{\sin x \approx x}$

Betrachte genauer die Funktion $D_t(\Omega)$

- $\Omega \to 0$: $\sin^2(\frac{\Omega}{2}t) \approx (\frac{\Omega}{2}t)^2$

$$D_t(\Omega) \xrightarrow[\Omega\to 0]{} \frac{t^2}{\hbar^2} \xrightarrow[t\to\infty]{} \infty$$

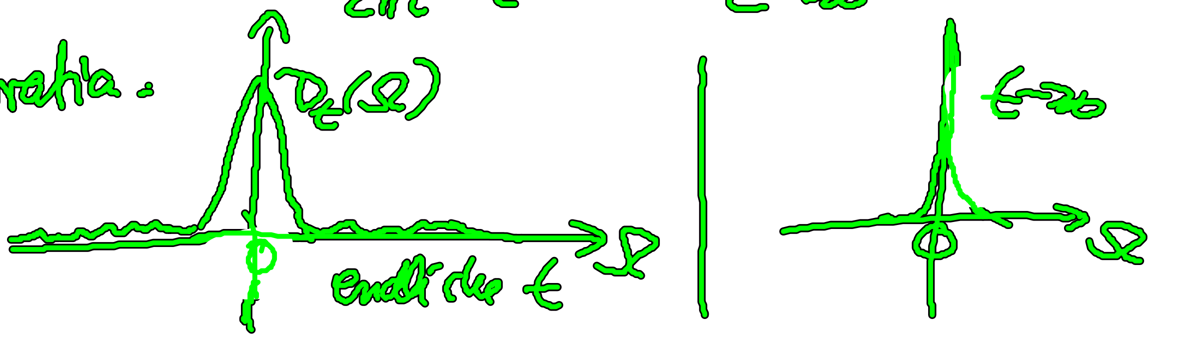
• außerdem gilt für das Integral

$$\int_{-\infty}^{\infty} dE\, D_t(\overset{\text{Energiedifferenz}}{E}) = \dots = \frac{2t\pi}{\hbar} \Rightarrow \frac{\hbar}{2\pi t}\int dE\, D_t(E) = 1$$

Beide Aussagen zusammen implizieren, daß

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

Illustration:



$$\Omega = \frac{E_m^{(0)} - E_k^{(0)}}{\hbar}$$

Folgerungen für die Übergangswahrscheinlichkeit

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

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

$$\xrightarrow[t\to\infty]{} \lambda^2 \left|\langle m^{(0)}|\hat{V}|k^{(0)}\rangle\right|^2 \frac{2\pi t}{\hbar} \delta(E_m^{(0)} - E_k^{(0)})$$

Man betrachtet häufig statt W_{mk} die Übergangsrate

$$\boxed{\tilde{W}_{mk} = \frac{W_{mk}}{t} \xrightarrow[t\to\infty]{} \frac{2\pi}{\hbar} \left|\langle m^{(0)}|\hat{V}|k^{(0)}\rangle\right|^2 \delta(E_m^{(0)} - E_k^{(0)})}$$

„Fermi's goldene Regel"

also:

Bei einer zeitlich konstanten Störung können nur solche Übergänge stattfinden, bei denen $E_m^{(0)} = E_k^{(0)}$ —

d.h., die Energie bleibt erhalten!

da $\delta(x)=0,\ x\neq 0$

Übergänge finden also höchstens zwischen entarteten Niveaus statt!

b) Periodische Störung

$$\hat{H}_1(t) = \hat{F} e^{-i\omega t} + \hat{F}^+ e^{+i\omega t}$$

$\Rightarrow \hat{H}_1$ ist hermitesch

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

Annahme: Störung $\hat{H}_1(t)$ wird eingeschaltet bei $t=0$

. Stördauer t_a sehr groß

~~mit~~ Einsetzen von $\hat{H}_1(t)$

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

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

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

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

$$\Rightarrow |g_m^{(1)}(t)|^2 = |\langle m^{(0)}|\hat{F}|k^{(0)}\rangle|^2\, D_t(E_m^{(0)}-E_k^{(0)}-\hbar\omega)$$

$$+ |\langle m^{(0)}|\hat{F}^+|k^{(0)}\rangle|^2\, D_t(E_m^{(0)}-E_k^{(0)}+\hbar\omega)$$

+ zwei gemischte Term

stellen sich als vernachlässigbar

Betrachte wieder große Zeiten

$$\frac{1}{2\pi t} D_t(\ldots) \to \delta(\ldots)$$

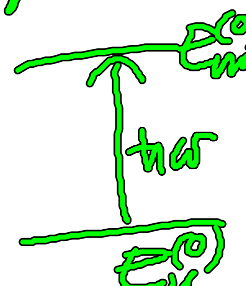
$$\hat{w}_{mk} = \frac{w_{mk}}{t} \xrightarrow{t\to\infty} \frac{2\pi}{\hbar} |\langle m^{(0)}|\hat{F}|k^{(0)}\rangle|^2 \delta(E_m^{(0)} - E_k^{(0)} - \hbar\omega)$$
$$+ \frac{2\pi}{\hbar} |\langle m^{(0)}|\hat{F}^{\dagger}|k^{(0)}\rangle|^2 \delta(E_m^{(0)} - E_k^{(0)} + \hbar\omega)$$

Fermi's Goldene Regel für periodische Störungen

Interpretation

- 1. Term ist nur ungleich Null für
  $E_m^{(0)} - E_k^{(0)} = \hbar\omega$ ← Frequenz der Störung

$\to$ Übergang von $E_k^{(0)}$ nach $E_m^{(0)}$ durch „Adsorption eines Quants" (Photon)



- Entsprechend 2. Term in $\hat{w}_{mk}$:

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

„Emission eines Quants"

$\Longrightarrow$ Goldene Regel beschreibt hier also $\overbrace{\text{induzierte}}^{\text{Übergänge mit}}$ Emission und Absorption

VII.3. Elektromagnet. Welle als Störung

Betrachte Elektron im Coulombpotential

$$\left(V \sim \frac{e_0}{r}\right)$$

$$\hat{H}_0 = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \hat{V}(r)$$

Was ist Einfluss einer elektromagnetischen Welle?

$\hookrightarrow$ Vektorpotential $\underline{A}(\underline{r},t) = \underline{A}_0 \cos(\underline{k}\cdot\underline{r} - \omega t)$

$\rightarrow$ elektrisches Feld

$$\underline{E}(\underline{r},t) = -\frac{\partial}{\partial t}\underline{A}(\underline{r},t) = -\omega \underline{A}_0 \sin(\underline{k}\cdot\underline{r} - \omega t)$$

magnet. Feld

$$\underline{B}(\underline{r},t) = \nabla \times \underline{A}(\underline{r},t) = -\underline{k} \times \underline{A}_0 \sin(\dots)$$

voller Hamiltonian:

$$\hat{H} = \frac{1}{2m}\left(\hat{p} - e_0 \underline{A}(\underline{r},t)\right)^2 + \hat{V}(r)$$

$\uparrow$ zeitabhängig!

$$\approx \hat{H}_0 - \frac{e_0}{m}\underline{A}(\underline{r},t)\cdot\hat{p}$$

$$\stackrel{!}{=} \hat{H}_0 + \hat{H}_1(t)$$

Vernachlässigung des Terms $\sim \underline{A}^2$ (diamagnet. Term)

$$\Rightarrow \hat{H}_1(t) = -\frac{e_0}{m}\underline{A}\cdot\hat{p}$$

$$= -\frac{e_0}{m}\underline{A}_0\cos(\underline{k}\cdot\underline{r} - \omega t)\,\hat{p}$$

$$\boxed{\cos x = \frac{1}{2}(e^{ix} + e^{-ix})}$$

$$= -\frac{e_0}{2m}\underline{A}_0 e^{i\underline{k}\cdot\underline{r}}\hat{p}\, e^{-i\omega t} - \frac{e_0}{2m}\underline{A}_0 e^{-i\underline{k}\cdot\underline{r}}\hat{p}\, e^{i\omega t}$$

Vergleich mit unserer früheren Schreibweise:

$$\hat{H}_1 = \hat{F} e^{-i\omega t} + \hat{F}^+ e^{+i\omega t}$$

$$\longrightarrow \hat{F} = -\frac{e_0}{2m} e^{i\underline{k}\cdot\underline{r}}\underline{A}_0\cdot\hat{p}$$

$$\hat{F}^+ = -\frac{e_0}{2m} e^{-i\underline{k}\cdot\underline{r}}\underline{A}_0\cdot\hat{p}$$

$\Rightarrow$ Übergangsrate:

$$\hat{w}_{mk} = \frac{w_{mk}}{t} \Rightarrow \frac{2\pi}{\hbar}\left(\frac{e_0}{2m}\right)^2 \Big(\langle m^{(0)} | e^{i\underline{k}\cdot\underline{r}} \underline{A}_0 \cdot \hat{\underline{p}} | k^{(0)} \rangle \cdot \delta(E_m^{(0)} - E_k^{(0)} - \hbar\omega)$$

$$+ \langle m^{(0)} | e^{-i\underline{k}\cdot\underline{r}} \underline{A}_0 \cdot \hat{\underline{p}} | k^{(0)} \rangle \cdot \delta(E_m^{(0)} - E_k^{(0)} + \hbar\omega) \Big)$$

typische Näherung („Dipolnäherung")

$$e^{\pm i\underline{k}\cdot\underline{r}} \approx 1$$

d.h. $\underline{k}\cdot\underline{r} \ll 1$

~~gut~~ dann gerechtfertigt, falls

$k \cdot a \ll 1 \Leftrightarrow \lambda \gg a$

$\frac{2\pi}{\lambda}$

Atomdurchmesser

bleibt auszuwerten

$\Rightarrow \langle m^{(0)} | \underline{A}_0 \cdot \hat{\underline{p}} | k_0 \rangle$

benutze: $[\hat{H}_0, \hat{\underline{r}}] = \ldots = \frac{\hbar}{im}\hat{\underline{p}}$

$$\Rightarrow \hat{\underline{p}} = \frac{im}{\hbar}(\hat{H}_0 \hat{\underline{r}} - \hat{\underline{r}} \hat{H}_0)$$

$\rightarrow -\frac{e_0}{2m} \langle m^{(0)} | \underline{A}_0 \hat{\underline{p}} | k^{(0)} \rangle$

$$= -\frac{i}{2\hbar} \underline{A}_0 \langle m^{(0)} | \hat{H}_0 \hat{\underline{r}} - \hat{\underline{r}} \hat{H}_0 | k^{(0)} \rangle$$

$$= -\frac{i}{\hbar} \frac{1}{2} (E_m^{(0)} - E_k^{(0)}) \underline{A}_0 \langle m^{(0)} | e_0 \hat{\underline{r}} | k^{(0)} \rangle \quad !$$

Erinnerung:

$e_0 \hat{\underline{r}}$: Operator des elektrischen Dipolmomentes!

definiere:

$$d_{mk} = \langle m^{(0)} | e_0 \hat{\underline{r}} | k^{(0)} \rangle$$

„Dipolmatrixelement"

$$\Rightarrow \tilde{W}_{mk} = \frac{2\pi}{\hbar} \frac{E_m^{(0)} - E_k^{(0)}}{4\hbar^2\omega^2} (\omega \underline{A}_0)^2 \underline{d}_{mk}^2$$

$$\left(\delta(E_m^{(0)} - E_k^{(0)} - \hbar\omega) + \delta(E_m^{(0)} - E_k^{(0)} + \hbar\omega) \right)$$

man sieht:

$\tilde{W}_{mk} \neq 0$ nur falls $\underline{d}_{mk} \neq 0$!

Das Auftreten des Dipolmatrixelements führt zu sogenannten „Auswahlregeln"

es stellt sich heraus:

$$\boxed{\begin{aligned} \Delta l &= \pm 1 \\ \Delta m &= 0, \pm 1 \end{aligned}}$$

„Dipolauswahlregeln"

ansonsten ist $\underline{d}_{mn} = 0$