1.2 Fermis goldene Regel [Sakurai 5.6]

Sei $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}(t)$;

Anfangszustand $|i\rangle$ $(t=t_0)$ ein Eigenzustand von $\hat{H}_0$, d.h. $\hat{H}_0|i\rangle = E_i|i\rangle$;

Endzustand $|f\rangle$ auch —— " ——, d.h. $\hat{H}_0|f\rangle = E_f|f\rangle$.

Wegen $[\hat{H}_0, \hat{V}] \neq 0$ finden Übergänge statt. Uns interessiert insbesondere die Transitions- bzw. Übergangsrate

$$\Gamma_{fi} := \lim_{t\to\infty} \frac{d}{dt} \left|\langle f | i(t)\rangle\right|^2 \quad ; \quad \left\{ \begin{array}{ll} |i(t_0)\rangle := |i\rangle & (\text{oft: } t_0 \to -\infty) \\ \text{bei } |f\rangle & \text{Zeitentwicklung ohne } \hat{V}\,! \end{array} \right.$$

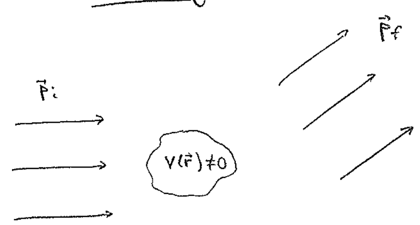
Beispiel: $\hat{H}_0 := \frac{\hat{p}^2}{2m}$; $\hat{V}(t) := V(\hat{r})$.

Eigenzustände von $\hat{H}_0$ sind die von $\hat{p}$, d.h. „ebene Wellen":

$$\hat{p}\,|\vec{p}_i\rangle = \vec{p}_i\,|\vec{p}_i\rangle$$

$$\Rightarrow -i\hbar\vec{\nabla}\langle\vec{x}|\vec{p}_i\rangle = \vec{p}_i\langle\vec{x}|\vec{p}_i\rangle \quad \Rightarrow \quad \langle\vec{x}|\vec{p}_i\rangle = \underbrace{\frac{c}{(2\pi\hbar)^{3/2}}}_{\text{Normierung } (c=1 \text{ ist eine mögliche Konvention})} e^{\frac{i\vec{p}_i\cdot\vec{x}}{\hbar}}$$

Es geht dann um Streuung:



(Bemerkung: Realistischer wären vielleicht „Wellenpakete": $|\langle\vec{p}\,|i\rangle|^2 = A(t_0)\exp\left(-\frac{|\vec{p}-\vec{p}_i|^2}{\Delta^2(t_0)}\right)$. Dies ist aber kein Eigenzustand von $\hat{H}_0$ und erfährt „Dispersion" auch ohne $\hat{V}$! (vgl. QM I))

Methode:

$$\langle f|i(t)\rangle \underset{\uparrow}{=} \langle f|\hat{U}(t;t_0)|i\rangle \underset{\uparrow}{=} \langle f_I|\hat{U}_I(t;t_0)|i_I\rangle$$

Schrödinger-Bild (Seite 4) $(i\hbar\partial_t\hat{U} = \hat{H}\hat{U})$

Dirac-Bild (Seite 6) $(i\hbar\partial_t\hat{U}_I = \hat{V}_I\hat{U}_I)$

Bemerkungen: (i) Auch beim zeitunabhängigen $\hat{V}$ führt man normalerweise eine bestimmte Zeitabhängigkeit ein, z.B. $\hat{V}(t) \to \hat{V}\,\theta(t)$ oder $\hat{V}(t) \to \hat{V}e^{\varepsilon t}$, $\varepsilon = 0^+$, um das Potential bei frühen Zeiten auszuschalten.

(ii) Um nur nichttriviale Übergänge zu betrachten wählen wir $|f\rangle \neq |i\rangle$, und $\langle f|i\rangle = 0$.

Erste Ordnung („Bornsche Näherung")

Sei $\hat{V}(t) := \hat{V}\cdot\Theta(t)$, und $|i_I\rangle, |f_I\rangle$ zeitunabhängig (die „freie" Zeitabhängigkeit wurde mittels $\exp(\frac{i}{\hbar}\hat{H}_0 t)$ „weggedreht", vgl. Seite 6).

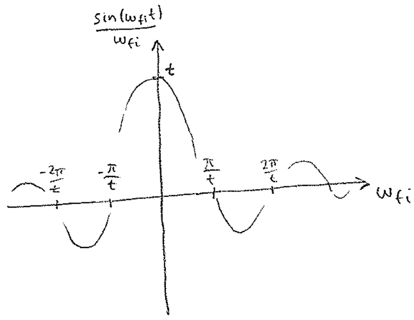
Dann ist
$$\langle f_I|\hat{U}_I(t;t_0)|i_I\rangle \underset{\text{Seite 6}}{\approx} \langle f_I|\mathbb{1} - \frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t} dt_1\, \hat{V}_I(t_1)|i_I\rangle$$
$$= -\frac{i}{\hbar}\int_0^t dt_1 \langle f_I| e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}_0 t_1}\,\hat{V}\,e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}_0 t_1}|i_I\rangle$$
$$= \underbrace{-\frac{i}{\hbar}\int_0^t dt_1\, e^{\frac{i}{\hbar}(E_f-E_i)t_1}}_{\frac{e^{\frac{i}{\hbar}(E_f-E_i)t}-1}{(E_f-E_i)}} \cdot \underbrace{\langle f_I|\hat{V}|i_I\rangle}_{\text{zeitunabhängig}}$$

Mittels $\omega_{fi} := \frac{E_f-E_i}{\hbar}$ kann der erste Faktor als $\frac{e^{\frac{i\omega_{fi}t}{2}}\left(e^{\frac{i\omega_{fi}t}{2}} - e^{-\frac{i\omega_{fi}t}{2}}\right)}{\hbar\omega_{fi}} = \frac{2i\, e^{\frac{i\omega_{fi}t}{2}}\sin\left(\frac{\omega_{fi}t}{2}\right)}{\hbar\omega_{fi}}$ ausgedrückt werden; folglich gilt

$$P_{fi}(t) := |\langle f_I|\hat{U}_I(t;t_0)|i_I\rangle|^2 \approx \frac{4}{(\hbar\omega_{fi})^2}\sin^2\left(\frac{\omega_{fi}t}{2}\right)|\langle f_I|\hat{V}|i_I\rangle|^2$$

und

$$W_{fi}(t) := \frac{d}{dt}|\langle f_I|\hat{U}_I(t;t_0)|i_I\rangle|^2 \approx \frac{2}{\hbar^2\omega_{fi}}\cdot\sin(\omega_{fi}t)\,|\langle f_I|\hat{V}|i_I\rangle|^2.$$



Bemerkung: Skizziere $\frac{\sin(\omega_{fi}t)}{\omega_{fi}}$ als Funktion von ω_{fi}:

$\Rightarrow$

für t endlich sind auch Übergänge mit $E_f - E_i \neq 0$ erlaubt, solange $|E_f-E_i|t \sim \hbar$ gilt.
(„Unschärferelation" für Energie)

Limes $t\to\infty$: Zur Erinnerung (EMTP II):

$$\underset{\text{Diracsche Deltafunktion}}{\delta(\omega)} = \lim_{t\to\infty}\int_{-t}^{t}\frac{dk}{2\pi}e^{ik\omega} = \lim_{t\to\infty}\left[\frac{e^{ik\omega}}{2\pi i\omega}\right]_{-t}^{t} = \lim_{t\to\infty}\frac{\sin(t\omega)}{\pi\omega}$$

Es folgt:

$$\Gamma_{fi} = \frac{2\pi}{\hbar^2}\lim_{t\to\infty}\frac{\sin(\omega_{fi}t)}{\pi\omega_{fi}}\cdot|\langle f_I|\hat{V}|i_I\rangle|^2$$
$$= \frac{2\pi}{\hbar^2}\delta(\omega_{fi})\,|\langle f_I|\hat{V}|i_I\rangle|^2$$
$$= \boxed{\frac{2\pi}{\hbar}\delta(E_f-E_i)\,|\langle f_I|\hat{V}|i_I\rangle|^2}$$

„Fermis goldene Regel"

Appendix: Exakte Berechnung (Skizze)

$$\hat V(t) := \hat V e^{\varepsilon t} \quad ; \ \varepsilon = 0^+ \qquad ; \qquad \hat H = \hat H_0 + \hat V(t)$$

$e^{\varepsilon t}$: verschwindet bei $t \to -\infty$

$\hat V$: zeitunabhängig

Zur ersten Ordnung:

$$\hat U_I(t;-\infty)|i_I\rangle = |i_I\rangle - \frac{i}{\hbar}\int_{-\infty}^{t} dt_1\, e^{\frac{i}{\hbar}\hat H_0 t_1} e^{\varepsilon t_1}\, \hat V e^{-\frac{i}{\hbar}\overset{E_i}{\hat H_0} t_1} |i_I\rangle$$

$$= |i_I\rangle - \frac{i}{\hbar}\int_{-\infty}^{t} dt_1\, e^{\frac{i}{\hbar}[\hat H_0 - E_i - i\varepsilon]t_1}\, \hat V |i_I\rangle$$

$$= \underbrace{e^{\frac{i}{\hbar}[\hat H_0 - E_i - i\varepsilon]t}}_{\text{zeitabhängig}} \underbrace{\left\{ e^{-\varepsilon t}|i_I\rangle - \frac{1}{\hat H_0 - E_i - i\varepsilon}\hat V(t) e^{-\varepsilon t}|i_I\rangle \right\}}_{\text{(fast) zeitunabhängig}}$$

Behauptung: $\hat U_I(t;-\infty)|i_I\rangle = e^{\frac{i}{\hbar}[\hat H_0 - E_i - i\varepsilon]t}\,|\tilde i_I\rangle$, wobei $|\tilde i_I\rangle$ für $\varepsilon \to 0^+$ die zeitunabhängige Gleichung

$$\boxed{|\tilde i_I\rangle = |i_I\rangle - \frac{1}{\hat H_0 - E_i - i0^+}\hat V |\tilde i_I\rangle} \quad (*)$$

erfüllt.

Beweis:

$$i\hbar\partial_t \left\{ e^{\frac{i}{\hbar}[\hat H_0 - E_i - i\varepsilon]t} |\tilde i_I\rangle \right\} = e^{\frac{i}{\hbar}[\hat H_0 - E_i - i\varepsilon]t} \left\{ \underbrace{-(\overset{E_i}{\hat H_0} - E_i - i\varepsilon)|i_I\rangle}_{O(\varepsilon)} + \hat V |\tilde i_I\rangle \right\}$$

$$= e^{\frac{i}{\hbar}\hat H_0 t}\, \hat V e^{-\frac{i}{\hbar}\hat H_0 t} \cdot e^{\frac{i}{\hbar}[\hat H_0 - E_i - i\varepsilon]t} |\tilde i_I\rangle$$

$$= \hat V_I(t) \left\{ e^{\frac{i}{\hbar}[\hat H_0 - E_i - i\varepsilon]t} |\tilde i_I\rangle \right\} \qquad \blacksquare$$

Es folgt:

$$c_{fi}(t) := \langle f_I|\hat U_I(t;-\infty)|i_I\rangle$$

$$\Rightarrow \frac{d}{dt}|c_{fi}|^2 = \frac{d}{dt}\{c_{fi}c_{fi}^*\} = \frac{dc_{fi}}{dt}c_{fi}^* + c_{fi}\frac{dc_{fi}^*}{dt} = 2\,\mathrm{Re}\left\{\frac{dc_{fi}}{dt}c_{fi}^*\right\}$$

$$* \quad \frac{dc_{fi}}{dt} = \langle f_I|\partial_t \hat U_I(t;-\infty)|i_I\rangle = \frac{1}{i\hbar}\langle f_I|\hat V_I \cdot e^{\frac{i}{\hbar}[\hat H_0 - E_i - i0^+]t}|\tilde i_I\rangle$$

$$= \frac{1}{i\hbar}\langle f_I| e^{\frac{i}{\hbar}\overset{E_f}{\hat H_0} t}\, \hat V e^{-\frac{i}{\hbar}E_i t}|\tilde i_I\rangle = \frac{1}{i\hbar} e^{\frac{i}{\hbar}(E_f - E_i)t}\langle f_I|\hat V|\tilde i_I\rangle$$

$$* \quad c_{fi}^*(t) = \underbrace{\left\{ -\langle\tilde i_I|\hat V \frac{1}{\hat H_0 - E_i + i0^+} + \langle i_I| \right\}}_{\langle\tilde i_I|} e^{-\frac{i}{\hbar}[\overset{E_f}{\hat H_0} - E_i + i\varepsilon]t}|f_I\rangle = -\frac{e^{-\frac{i}{\hbar}(E_f - E_i)t}}{E_f - E_i + i0^+}\langle\tilde i_I|\hat V|f_I\rangle$$

$\langle i_I|f_I\rangle = 0$; $\varepsilon = 0^+$

$$\Rightarrow \frac{d}{dt}|c_{fi}|^2 = 2\,\mathrm{Re}\left\{ \frac{i}{\hbar}\cdot\frac{1}{E_f - E_i + i0^+} |\langle f_I|\hat V|\tilde i_I\rangle|^2 \right\}$$

keine t mehr!!

Benutze (MMP I) $\frac{1}{x + i0^+} = P\left(\frac{1}{x}\right) - i\pi\delta(x)$ $\Rightarrow$

$$\boxed{\Gamma_{fi} = \frac{2\pi}{\hbar}\,\delta(E_f - E_i)\,|\langle f_I|\hat V|\tilde i_I\rangle|^2}$$

Also wie auf Seite 8, aber der Anfangszustand enthält unendliche viele Korrekturen durch die „Lippmann-Schwinger-Gleichung" (*). (Vgl. Kap. 2.1.)

—∘—

Wirkungsquerschnitt (Streuquerschnitt)

Eigentlich sieht die Fermi-Regel komisch aus: $\delta(E_f - E_i)$ ist entweder null oder unendlich! In der Praxis ist das Energiespektrum aber häufig kontinuierlich und das Ergebnis kann noch durch eine angemessene Umschreibung „gerettet" werden.

Eine angrenzende Frage ist, wie man den Anfangs- und Endzustand normieren soll: $\langle i_I | i_I \rangle = 1$ wäre schön aber z.B. bei ebenen Wellen unmöglich!

Anfangszustand:

$$|i_I\rangle \to |\vec{k}_i\rangle \qquad (\vec{p} =: \hbar\vec{k})$$

Seite 7 $\to$ $\langle \vec{x} | \vec{k}_i^{(c)} \rangle := \frac{c}{(2\pi)^{3/2}} e^{i\vec{k}_i \cdot \vec{x}}$

Normierung: $\langle \vec{k}_i^{(c)} | \vec{k}_j^{(c)} \rangle = \int d^3\vec{x} \langle \vec{k}_i^{(c)} | \vec{x} \rangle \langle \vec{x} | \vec{k}_j^{(c)} \rangle = |c|^2 \delta^{(3)}(\vec{k}_i - \vec{k}_j)$.

Dividiere Übergangsrate $[\frac{1}{s}]$ durch Strom $[\frac{1}{m^2 s}]$ =: Wirkungsquerschnitt $[m^2]$

QM I: Strom = $\vec{j}_i = \frac{\hbar}{m} \mathrm{Im}\{\psi^* \nabla \psi\} = \frac{\hbar \vec{k}_i}{m} \frac{|c|^2}{(2\pi)^3}$

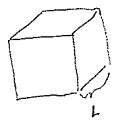
$$\Rightarrow \sigma_{fi} = \frac{\Gamma_{fi}}{|\vec{j}_i|} = \frac{(2\pi)^4 m}{\hbar^2 |c|^2 |\vec{k}_i|} \delta(E_f - E_i) \, |\langle f_I | \hat{V} | \vec{k}_i^{(c)} \rangle|^2$$

Endzustand:

$$\int dE_f \, \delta(E_f - E_i) = 1 = \langle f_I | f_I \rangle$$

$\Rightarrow$ wir können $\delta(E_f - E_i)$ als $\frac{dN_f}{dE_f}$ (Anzahl erlaubter Endzustände) interpretieren, falls wir gleichzeitig den Hilbert-Raum so „regularisieren", dass die Zustände normierbar sind.

Nehme einen endlichen Würfel mit periodischen Randbedingungen:



$$e^{i\vec{k}_f \cdot (\vec{x} + L\vec{e}_i)} = e^{i\vec{k}_f \cdot \vec{x}}$$

$$\Rightarrow \vec{k}_f = \frac{2\pi}{L} \vec{n}; \quad \vec{n} \in \mathbb{Z}^3.$$

Normierung: $\langle \vec{x} | \vec{k}_f^{(L)} \rangle := \frac{1}{L^{3/2}} e^{i\vec{k}_f \cdot \vec{x}}$;

$$\langle \vec{k}_f^{(L)} | \vec{k}_g^{(L)} \rangle = \int_{L^3} d^3\vec{x} \, \langle \vec{k}_f^{(L)} | \vec{x} \rangle \langle \vec{x} | \vec{k}_g^{(L)} \rangle = \underbrace{\delta_{\vec{k}_f, \vec{k}_g}}_{\text{Kronecker}} \quad \text{OK!}$$

Anzahl von Endzuständen:

$$dN_f = dn_x \, dn_y \, dn_z = \left(\frac{L}{2\pi}\right)^3 dk_x \, dk_y \, dk_z$$

$$= \left(\frac{L}{2\pi}\right)^3 d^3\vec{k}_f = \left(\frac{L}{2\pi}\right)^3 |\vec{k}_f|^2 dk_f \, \underbrace{d\Omega_f}_{\text{Raumwinkel}}$$

$$E_f = \frac{\hbar^2 k_f^2}{2m} \Rightarrow dE_f = \frac{\hbar^2 k_f}{m} dk_f \Leftrightarrow dk_f = \frac{m}{\hbar^2 k_f} dE_f$$

$$\Rightarrow dN_f = \left(\frac{L}{2\pi}\right)^3 \frac{m|\vec{k}_f|}{\hbar^2} dE_f \, d\Omega_f \Rightarrow \frac{dN_f}{dE_f} = \left(\frac{L}{2\pi}\right)^3 \frac{m|\vec{k}_f|}{\hbar^2} d\Omega_f$$

$$\Rightarrow \boxed{\frac{d\sigma_{fi}}{d\Omega_f} = \underbrace{\frac{(2\pi)^4 m}{\hbar^2 |c|^2 |\vec{k}_i|} \left(\frac{L}{2\pi}\right)^3 \frac{m|\vec{k}_f|}{\hbar^2}}_{\left(\frac{2\pi}{\hbar}\right)^4 \frac{m^2}{|c|^2} \left(\frac{L}{2\pi}\right)^3} \left| \langle \vec{k}_f^{(L)} | \hat{V} | \vec{k}_i^{(c)} \rangle \right|^2 \Big|_{|\vec{k}_f| = |\vec{k}_i|}}$$