

# 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

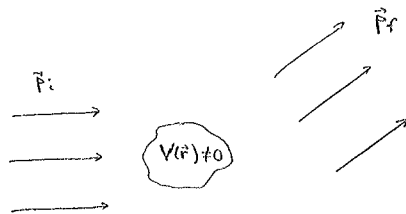
$$\Gamma_{fi} := \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{d}{dt} |\langle f | i(t) \rangle|^2 ; \quad \begin{cases} * |i(t_0)\rangle := |i\rangle \quad (\text{oft: } t_0 \rightarrow -\infty) \\ * \text{ bei } |f\rangle \text{ Zeitentwicklung ohne } \hat{V}! \end{cases}$$

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

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

$$\hat{p}|\vec{p}_i\rangle = \vec{p}_i|\vec{p}_i\rangle \Rightarrow -i\hbar \nabla \langle \vec{x} | \vec{p}_i \rangle = \vec{p}_i \langle \vec{x} | \vec{p}_i \rangle \Rightarrow \langle \vec{x} | \vec{p}_i \rangle = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} e^{i\vec{p}_i \cdot \vec{x} / \hbar}$$

Es geht dann um Streuung:



Normierung (eine mögliche Konvention)

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. QTI)

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

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.  $\hat{V}(t) \rightarrow \hat{V}\theta(t)$  oder  $\hat{V}(t) \rightarrow \hat{V}e^{\epsilon t}$ ,  $\epsilon = 0^+$ , 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  $\langle f_I | \hat{U}_I(t; t_0) | i_I \rangle \approx \langle f_I | \mathbb{1} - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t dt_1 \hat{V}_I(t_1) | i_I \rangle$

(Seite 6)  $\Rightarrow$

$$= -\frac{i}{\hbar} \int_0^t dt_1 \langle f_I | e^{\frac{i}{\hbar} \hat{H}_0 t_1} \hat{V} e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}_0 t_1} | i_I \rangle$$

$$= -\frac{i}{\hbar} \int_0^t dt_1 e^{\frac{i}{\hbar} (E_f - E_i) t_1} \cdot \underbrace{\langle f_I | \hat{V} | i_I \rangle}_{\text{Zeitunabhängig}}$$

$\frac{e^{\frac{i}{\hbar} (E_f - E_i) t} - 1}{(E_f - E_i)}$

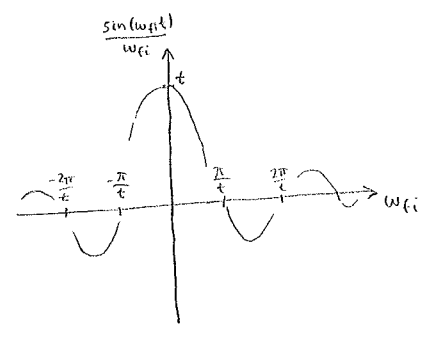
Mittels  $\omega_{fi} := \frac{E_f - E_i}{\hbar}$  kann der erste Faktor als  $\frac{e^{i\omega_{fi}t} - 1}{\hbar \omega_{fi}} = \frac{2i e^{i\frac{\omega_{fi}t}{2}} \sin(\frac{\omega_{fi}t}{2})}{\hbar \omega_{fi}}$  ausgedrückt werden; folglich gilt

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

Und

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

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



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

Limes  $t \rightarrow \infty$ : Zur Erinnerung (MMP II):

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

Es folgt:

$$\Gamma_{fi} = \frac{2\pi}{\hbar^2} \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{\sin(\omega_{fi}t)}{\pi \omega_{fi}} \cdot |\langle f_I | \hat{V} | i_I \rangle|^2$$

$$= \frac{2\pi}{\hbar^2} \delta(\omega_{fi}) |\langle f_I | \hat{V} | i_I \rangle|^2$$

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

"Fermis goldene Regel"

Appendix: Exakte Berechnung (Skizze)

$\hat{V}(t) := \hat{V} e^{\epsilon t}$  ;  $\epsilon = 0^+$  ;  $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}(t)$   
 verschwindet beim  $t \rightarrow -\infty$   
 Zeitunabhängig

Zur ersten Ordnung :  $\hat{U}_I(t; -\infty) |i_I\rangle = |i_I\rangle - \frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^t dt_1 e^{\frac{i}{\hbar} \hat{H}_0 t_1} \epsilon t_1 \hat{V} e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}_0 t_1} |i_I\rangle$   
 $= |i_I\rangle - \frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^t dt_1 e^{\frac{i}{\hbar} [\hat{H}_0 - E_i - i\epsilon] t_1} \hat{V} |i_I\rangle$   
 $= e^{\frac{i}{\hbar} [\hat{H}_0 - E_i - i\epsilon] t} \left\{ e^{-\epsilon t} |i_I\rangle - \frac{1}{\hat{H}_0 - E_i - i\epsilon} \hat{V}(t) e^{-\epsilon t} |i_I\rangle \right\}$   
 zeitabhängig (fast) zeitunabhängig

Behauptung:  $\hat{U}_I(t; -\infty) |i_I\rangle = e^{\frac{i}{\hbar} [\hat{H}_0 - E_i - i\epsilon] t} |\tilde{i}_I\rangle$ , wobei  $|\tilde{i}_I\rangle$  für  $\epsilon \rightarrow 0^+$  die zeitunabhängige Gleichung  $|\tilde{i}_I\rangle = |i_I\rangle - \frac{1}{\hat{H}_0 - E_i - i0^+} \hat{V} |\tilde{i}_I\rangle$  erfüllt. (\*)

Beweis:  $i\hbar \frac{d}{dt} \left\{ e^{\frac{i}{\hbar} [\hat{H}_0 - E_i - i\epsilon] t} |\tilde{i}_I\rangle \right\} = e^{\frac{i}{\hbar} [\hat{H}_0 - E_i - i\epsilon] t} \left\{ -(\hat{H}_0 - E_i - i\epsilon) |\tilde{i}_I\rangle + \hat{V} |\tilde{i}_I\rangle \right\}$   
 $= e^{\frac{i}{\hbar} \hat{H}_0 t} \hat{V} e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}_0 t} \times e^{\frac{i}{\hbar} [\hat{H}_0 - E_i - i\epsilon] t} |\tilde{i}_I\rangle$   
 $= \hat{V}_I(t) \left\{ e^{\frac{i}{\hbar} [\hat{H}_0 - E_i - i\epsilon] t} |\tilde{i}_I\rangle \right\}$

Es folgt:  $C_{fi}(t) := \langle f_I | \hat{U}_I(t; -\infty) |i_I\rangle$   
 $\Rightarrow \frac{d}{dt} |C_{fi}|^2 = \frac{d}{dt} \{ C_{fi} C_{fi}^* \} = \frac{dC_{fi}}{dt} C_{fi}^* + C_{fi} \frac{dC_{fi}^*}{dt} = 2 \operatorname{Re} \left\{ \frac{dC_{fi}}{dt} C_{fi}^* \right\}$   
 $* \frac{dC_{fi}}{dt} = \langle f_I | \frac{d}{dt} \hat{U}_I(t; -\infty) |i_I\rangle = \frac{1}{i\hbar} \langle f_I | \hat{V}_I \cdot e^{\frac{i}{\hbar} [\hat{H}_0 - E_i - i0^+] t} |\tilde{i}_I\rangle$   
 $= \frac{1}{i\hbar} \langle f_I | e^{\frac{i}{\hbar} \hat{H}_0 t} \hat{V} e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}_0 t} e^{\frac{i}{\hbar} E_i t} |\tilde{i}_I\rangle = \frac{1}{i\hbar} e^{\frac{i}{\hbar} (E_f - E_i) t} \langle f_I | \hat{V} |\tilde{i}_I\rangle$   
 $* C_{fi}^*(t) = \left\{ -\langle \tilde{i}_I | \hat{V} \frac{1}{\hat{H}_0 - E_i + i0^+} + \langle i_I | \right\} e^{-\frac{i}{\hbar} [\hat{H}_0 - E_i + i\epsilon] t} |f_I\rangle = -\frac{e^{-\frac{i}{\hbar} (E_f - E_i) t}}{E_f - E_i + i0^+} \langle \tilde{i}_I | \hat{V} |f_I\rangle$   
 $\langle i_I | f_I \rangle = 0, \epsilon = 0^+$

$\Rightarrow \frac{d}{dt} |C_{fi}|^2 = 2 \operatorname{Re} \left\{ \frac{i}{\hbar} \frac{1}{E_f - E_i + i0^+} |\langle f_I | \hat{V} |\tilde{i}_I\rangle|^2 \right\}$  keine t mehr !!

Benutze  $\frac{1}{x+i0^+} = \mathcal{P}\left(\frac{1}{x}\right) - i\pi \delta(x) \Rightarrow \Gamma_{fi} = \frac{2\pi}{\hbar} \delta(E_f - E_i) |\langle f_I | \hat{V} |\tilde{i}_I\rangle|^2$

Also wie auf Seite 8, aber der Anfangszustand enthält unendliche viele Korrekturen durch die "Lippmann-Schwinger-Gleichung" (\*)  $\Rightarrow$  (Kapitel 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:  $\langle i_{\mathbb{I}} | i_{\mathbb{I}} \rangle = 1$  wäre schön, aber z.B. bei ebenen Wellen unmöglich!

Anfangszustand:

$|i_{\mathbb{I}}\rangle \rightarrow |\vec{k}_i\rangle \quad (\vec{p} = \hbar \vec{k})$

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

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  $[m^2]$

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

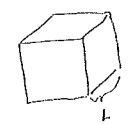
$\Rightarrow \partial_{fi} = \frac{\Gamma_{fi}}{|\vec{j}_i|} = \frac{(2\pi)^4 m}{\hbar^2 |c|^2 |\vec{k}_i|} \delta(E_f - E_i) |\langle f_{\mathbb{I}} | \hat{V} | \vec{k}_i^{(c)} \rangle|^2$

Endzustand:

$\int dE_f \delta(E_f - E_i) = 1 = \langle f_{\mathbb{I}} | f_{\mathbb{I}} \rangle$  Anzahl erlaubter Endzustände

$\Rightarrow$  wir können  $\delta(E_f - E_i)$  als  $\frac{dN_f}{dE_f}$  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:  $\langle \vec{x} | \vec{k}_f^{(c)} \rangle := \frac{1}{L^{3/2}} e^{i\vec{k}_f \cdot \vec{x}}$

$\langle \vec{k}_f^{(c)} | \vec{k}_g^{(c)} \rangle = \int d^3\vec{x} \langle \vec{k}_f^{(c)} | \vec{x} \rangle \langle \vec{x} | \vec{k}_g^{(c)} \rangle = \delta_{\vec{k}_f, \vec{k}_g}$  Kronecker OK!

Anzahl von Endzuständen:

$dN_f = dn_x dn_y dn_z = \left(\frac{L}{2\pi}\right)^3 dk_x dk_y dk_z$  Raumwinkel  
 $= \left(\frac{L}{2\pi}\right)^3 d^3\vec{k}_f = \left(\frac{L}{2\pi}\right)^3 |\vec{k}_f|^2 dk_f d\Omega_f$

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

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

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

$\left(\frac{2\pi}{\hbar}\right)^4 \frac{m^2}{|c|^2} \left(\frac{L}{2\pi}\right)^3 \quad (\rightarrow \text{Seite 20})$