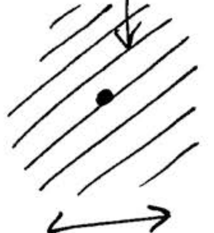
Schnelle Abschätzung via Heisenbergs Unschärferelation:

Wellenfkt. des H-Atoms



$\sim \Delta x$

$$\Delta p^2 \cdot \Delta x^2 \geq \left(\frac{\hbar}{2}\right)^2$$

$\Rightarrow$ setze

$$\langle p^2 \rangle = \Delta p^2 \approx \left(\frac{\hbar}{2\Delta x}\right)^2$$

$\langle p \rangle = 0$

Idee:
Δx klein
$\Rightarrow$ gut für potentielle Energie,
schlecht für kinetische Energie

$$\Rightarrow \quad E = \frac{\langle \vec{p}^{\,2} \rangle}{2m} - \left\langle \frac{q^2}{4\pi\varepsilon_0 r} \right\rangle$$

$$\underset{\text{grob}}{\approx} \frac{\hbar^2}{m^* \Delta x^2} \cdot \text{const} - \frac{q^2}{4\pi\varepsilon_0 \Delta x} \cdot \text{const}$$

(Zahlenfaktoren in dieser Abschätzung weggelassen)

nun: variiere Δx, um E_{min} zu finden!

$$E \stackrel{!}{=} \min$$

$$\Leftrightarrow \frac{\partial}{\partial \Delta x} E = 0$$

$\Rightarrow$ für diese Näherung für E:

$$-\frac{2\hbar^2}{m^* \Delta x^3} + \frac{q^2}{4\pi\varepsilon_0 \Delta x^2} \approx 0$$

Ausdehnung: $\Rightarrow \quad \Delta x \approx (\text{const.}) \dfrac{4\pi\varepsilon_0}{q^2} \cdot \dfrac{\hbar^2}{m}$ ✓

(vgl. Längenskala C^{-1} aus e^{-Cr})

Energie: Bem.: offenbar wird nach Minimierung

$$E_{pot} = -2E_{kin}$$

(folgt auch aus "Virialsatz" klassisch)

$$\Rightarrow \quad E = E_{pot} + E_{kin} = -E_{kin}$$

$$= -\text{const} \frac{\hbar^2}{m \Delta x^2}$$

$$= -\text{Const} \cdot \frac{q^4}{(4\pi\varepsilon_0)^2} \cdot \frac{m}{\hbar^2} \quad ✓$$

richtige Parameterabh.keit!

Höhere Anregungszustände:

$$\text{Ansatz: } \phi(r) \sim \underbrace{f(r)}_{\text{Polynom}} e^{-\overbrace{\tilde{C}}^{\text{vom Zustand abhängige Konstante}} r}$$

Ergebnis:
(s. Lehrbücher...)

mit re-skalierten Abstand

$$\rho = \frac{2r}{n a_0} \quad \text{Bohr radius } a_0 = \frac{4\pi\varepsilon_0 \hbar^2}{m q^2}$$

findet man:

$$\psi_{n,l,m}(r,\theta,\varphi) = \underbrace{N_{n,l,m}}_{\text{Normierung}} \cdot e^{-\frac{\rho}{2}} \rho^{l} L^{2l+1}_{n-l-1}(\rho)\, Y_{l,m}(\theta,\varphi)$$

$$\left.\begin{aligned} n &= 1, 2, 3, \ldots \\ l &= 0, 1, \ldots, n-1 \\ -l \leq\ &m \leq l \end{aligned}\right\} \text{ drei Quantenzahlen}$$

$L^{2l+1}_{n-l-1}(\rho)$: "verallgemeinertes Laguerre-Polynom"

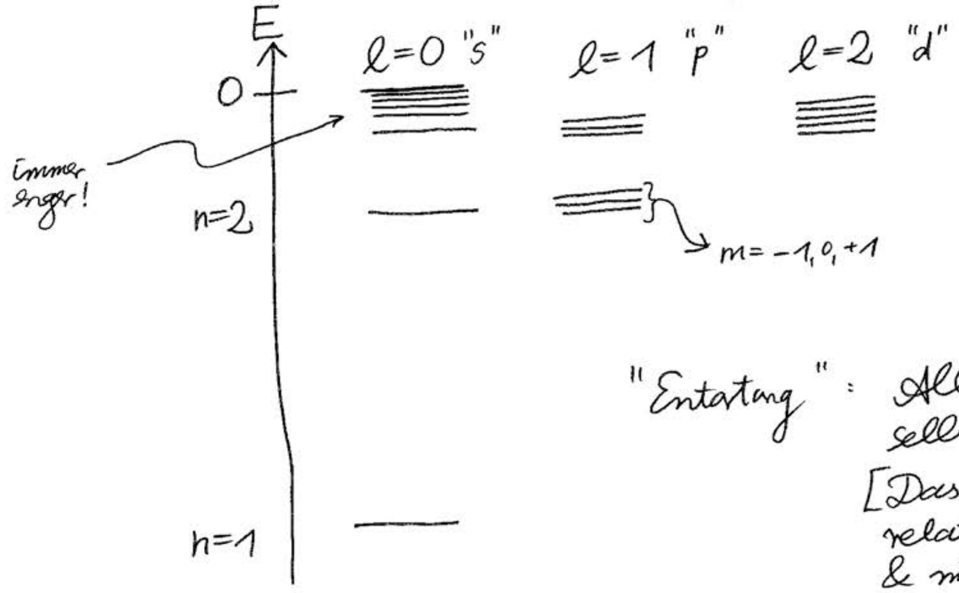
$$L^{\alpha}_{k}(x) = \frac{x^{-\alpha} e^{x}}{k!} \frac{d^k}{dx^k}\left(e^{-x} x^{k+\alpha}\right)$$

[Check: $n=1, l=0$: $L^1_0(x) = 1 \rightsquigarrow$ liefert Grundzustand, den wir schon hatten]

Die Energieniveaus:

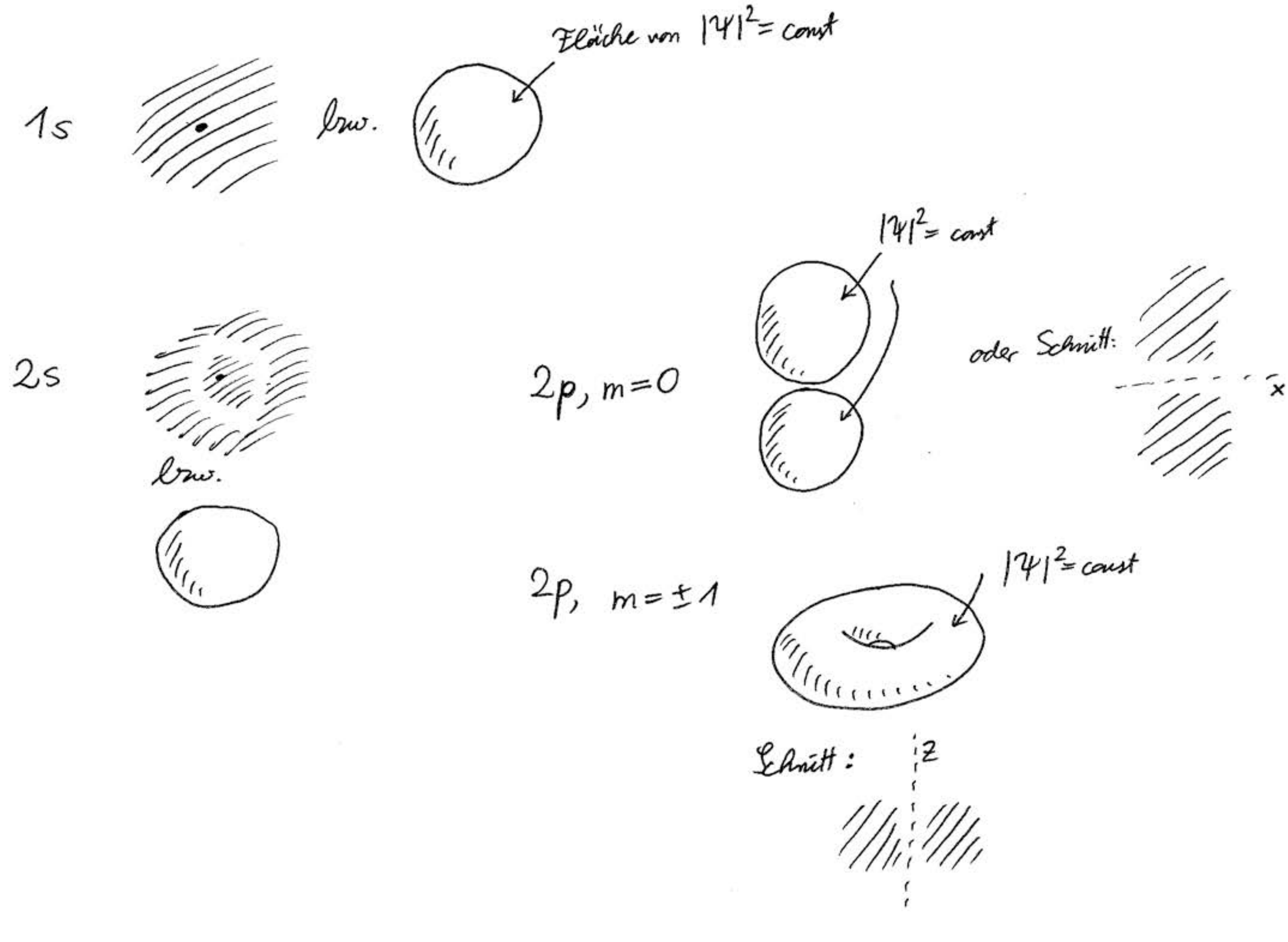
$$E_{n,\ell,m} = \frac{E_{n=1,\ell=m=0}}{n^2}$$

$E_{n=1,\ell=m=0} \to -13{,}6\,\mathrm{eV}$



"Entartung": Alle Energien zum selben n sind gleich.
[Das ändert sich etwas in relativistische Beschreibung & mit Quantenelektrodynamik]

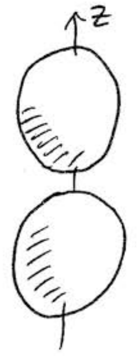
Die Atomorbitale (= Wellenfunktionen der Energie-Eigenzustände):



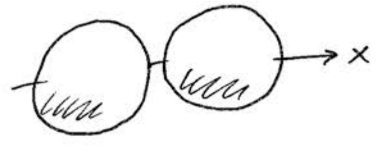
Alternative Basis im $l=1$ Eigenraum

(dürfen diese entarteten Zustände neu kombinieren!)

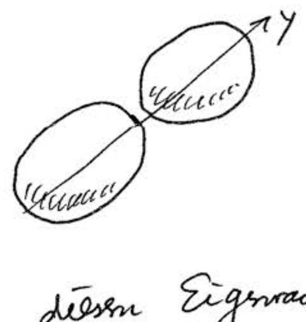
"p_z": $\psi_{n,\,l=1,\,m=0}$



"p_x": $\frac{1}{\sqrt{2}}\left(\psi_{n,\,l=1,\,m=+1} + \psi_{n,\,l=1,\,m=-1}\right)$

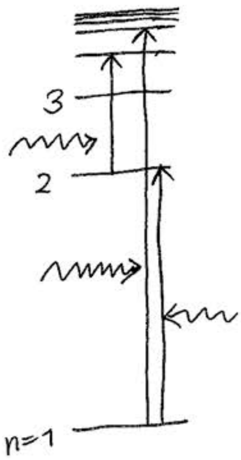


"p_y": $\frac{1}{\sqrt{2}}\left(\psi_{n,\,l=1,\,m=+1} - \psi_{n,\,l=1,\,m=-1}\right)$



→ neue VONB in diesem Eigenraum,
Eigenzustände zu $\hat{\vec{L}}^2$,
aber nicht mehr $\hat{L}_z$
(weil verschiedene m kombiniert)

Spektrallinien: <u>Übergänge</u> zwischen Niveaus



$$\hbar\omega = E_{\text{oben}} - E_{\text{unten}}$$

$\uparrow$

Photonfrequenz (absorbiert bzw. emittiert)

Beispiel:

"Lyman-α-Linie": $n=1 \rightarrow n=2$:

$$\hbar\omega = -13{,}6\,eV \cdot \underbrace{\left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{1^2}\right)}_{-\frac{3}{4}}$$

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

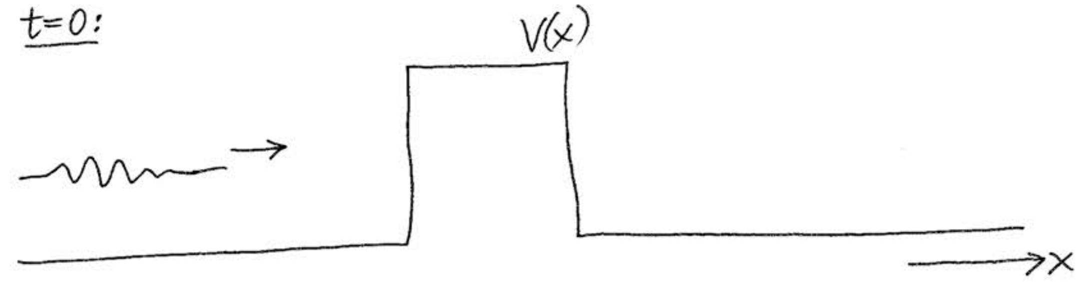
$$k = \frac{\omega}{c}$$

$$\Rightarrow \lambda = \dots \approx 121{,}6 \text{ nm}$$

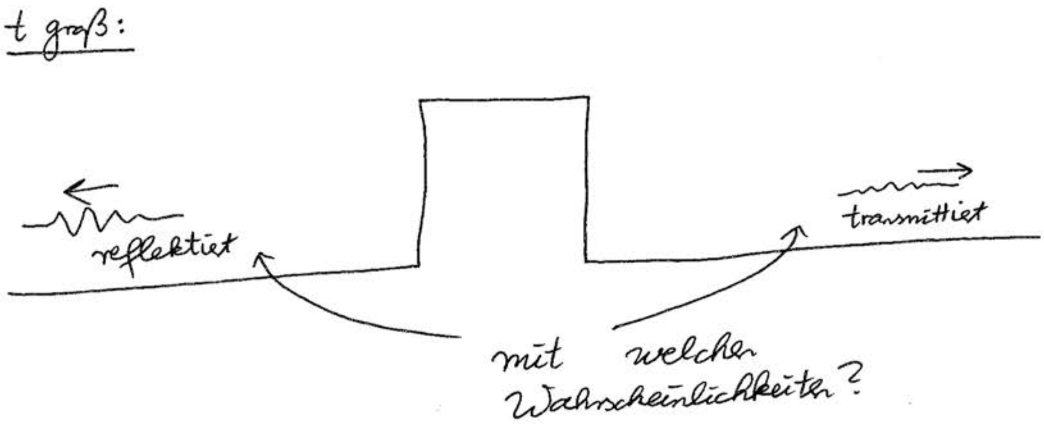
$\Rightarrow$ Wasserstoffabsorption in intergalaktischen Gaswolken, rotverschoben je nach Fluchtgeschwindigkeit der Wolke: "Lyman-α-Wald"

5. Streuung von Materiewellen

(hier nur: 1D)



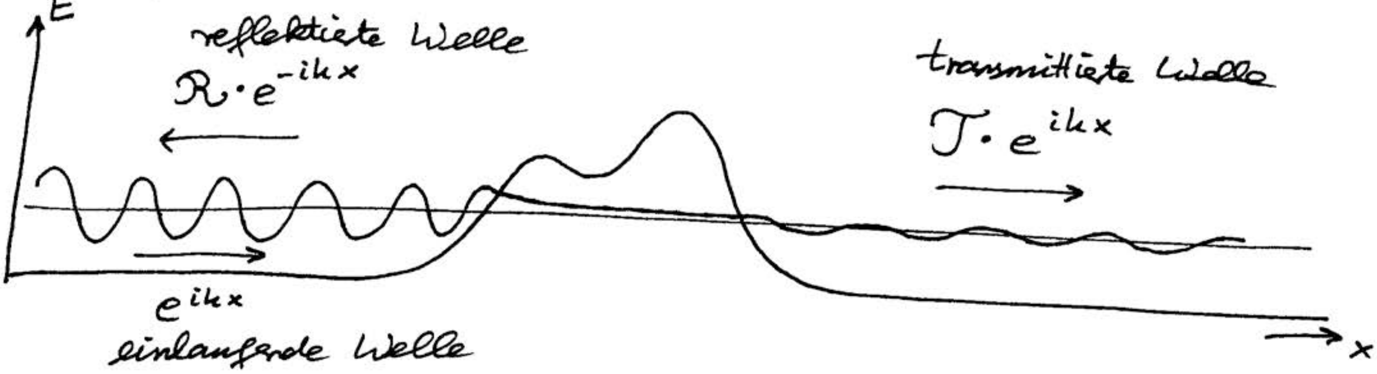
$\Downarrow$



$\rightsquigarrow$ Üblicher Ansatz: Stationäre Situation, mit konstanter einfallender Stromdichte

(nicht Wellenpaket-Dynamik)

Allgemeiner Ansatz:



unendlich ausgedehnte (nicht normierbare) Welle, löst $\hat{H}\psi = E\psi$
= „Streuzustand"

$\mathcal{T}$ = "Transmissionsamplitude"
$\mathcal{R}$ = "Reflexionsamplitude"

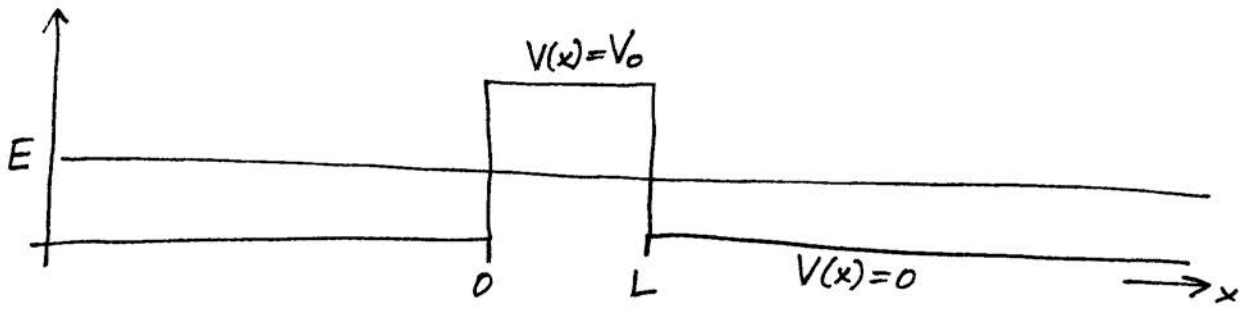
Verhältnis der Stromdichten (mit $j = \mathrm{Re}\left[\psi^* \frac{-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}}{m}\psi\right]$):

$$\frac{j_{\text{transmittiert}}}{j_{\text{einlaufend}}} = \frac{|\mathcal{T}|^2 \cdot \frac{\hbar k}{m}}{1 \cdot \frac{\hbar k}{m}} = \underbrace{|\mathcal{T}|^2}_{\text{Transmissions-wahrscheinlichkeit}}$$

analog: $|\mathcal{R}|^2$

[Bem.: Aus Dimensionsgründen müsste e^{ikx} usw. alles mit einem Faktor $\frac{1}{\sqrt{\text{Länge}}}$ multipliziert werden, aber es wäre derselbe überall, der bei dem Verhältnis wieder rausfällt]

Beispiel: Kastenpotential als Barriere



Idee: Löse $\hat{H}\psi = E\psi$ separat in Teilbereichen & dann stetige Verbindung der Lösungen!

$x > L$: nur transmittierte Welle

$$\psi(x) = T \cdot e^{ikx}$$

Das k aus:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\partial_x^2 \psi = E\psi \Leftrightarrow \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = E$$

$$\Rightarrow k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$$

$x \leq 0$: einlaufende & reflektierte Welle

$$\psi(x) = 1 \cdot e^{ikx} + R \cdot e^{-ikx}$$

k wie oben!

$0 < x < L$: Falls $E < V_0$ (anderer Fall: s. später)

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\partial_x^2 \psi + V_0 \psi = E\psi$$

$$\Rightarrow \quad \partial_x^2 \psi = \frac{2m}{\hbar^2}\underbrace{(V_0 - E)}_{>0}\psi$$

$\Rightarrow$ allgemeine Lsg. ist

$$\psi(x) = A \cdot e^{\tilde{k}x} + B e^{-\tilde{k}x}$$

mit $\tilde{k} = \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar}$ (keine Oszillation: kein i)

Anschlussbedingungen:

ψ und ψ' sind überall stetig!

(denn sonst: ψ' oder ψ'' enthält $\delta(\cdot)$-Funktion, obwohl $V(x)$ nie ∞ wird $\Rightarrow$ $\lightning$ zur SGl)

(Bem.: Einzige Ausnahme ist ein δ-Potential $V(x) = V_0\,\delta(x)$)

$\Rightarrow$ von rechts nach links:

<u>$x=L$:</u>

$$\psi(x=L-0) \stackrel{!}{=} \psi(x=L+0)$$

$$A e^{\tilde{k}L} + B e^{-\tilde{k}L} \stackrel{!}{=} J e^{ikL} \qquad (1)$$

$$\psi'(x=L-0) \stackrel{!}{=} \psi'(x=L+0)$$

$$A\tilde{k} e^{\tilde{k}L} - B\tilde{k} e^{-\tilde{k}L} = ikJ e^{ikL} \qquad (2)$$

$\Rightarrow$ Erhalte A, B aus diesen 2 Glg.en:

z.B. $(1)\cdot\tilde{k} + (2) \Rightarrow$

$$2A\tilde{k}e^{\tilde{k}L} = (\tilde{k}+ik) J e^{ikL}$$

$$\Rightarrow A = \frac{1}{2}\left(1 + i\frac{k}{\tilde{k}}\right) J e^{(ik-\tilde{k})L}$$

weiter: $(1)\cdot\tilde{k} - (2) \Rightarrow$

$$2B\tilde{k}e^{-\tilde{k}L} = (\tilde{k}-ik) J e^{ikL}$$

$$\Rightarrow B = \frac{1}{2}\left(1 - i\frac{k}{\tilde{k}}\right) J e^{(ik+\tilde{k})L}$$

$x = 0$:

$$\Psi(x=-0) \stackrel{!}{=} \Psi(x=+0)$$

soll heißen $\Psi(x \uparrow 0)$ $\qquad$ $\Psi(x \downarrow 0)$

$$1 + R = A + B \qquad (3)$$

$$\Psi'(x=-0) \stackrel{!}{=} \Psi'(x=+0)$$

$$\Rightarrow \quad ik(1-R) = \tilde{k}(A-B) \qquad (4)$$

A, B einsetzen $\Rightarrow$ 2 Glg.-en, für R, T!

$$(3) \Rightarrow \quad R = A + B - 1$$

$$R \underset{\text{von oben}}{=} \frac{Te^{ikL}}{2} \cdot \left\{ \left(1 + i\frac{k}{\tilde{k}}\right) e^{-\tilde{k}L} + \left(1 - i\frac{k}{\tilde{k}}\right) e^{+\tilde{k}L} \right\} - 1$$

$\Rightarrow$ Beziehung zwischen R & T

Aber was ist T?

$$ik \cdot (3) + (4) \Rightarrow$$

$$2ik = (ik + \tilde{k})A + (ik - \tilde{k})B$$

$$= \tilde{k}\left(1 + i\frac{k}{\tilde{k}}\right)A - \tilde{k}\left(1 - i\frac{k}{\tilde{k}}\right)B$$

$$\underset{\text{von oben}}{\Rightarrow} \quad 2i\frac{k}{\tilde{k}} = \frac{Te^{ikL}}{2} \cdot \left\{ \left(1 + i\frac{k}{\tilde{k}}\right)^2 e^{-\tilde{k}L} - \left(1 - i\frac{k}{\tilde{k}}\right)^2 e^{+\tilde{k}L} \right\}$$

mit Abkürzung $z = \frac{k}{\tilde{k}}$:

$$Te^{ikL} = \frac{4iz}{(1+iz)^2 e^{-\tilde{k}L} - (1-iz)^2 e^{+\tilde{k}L}}$$

Transmissionsamplitude durch Rechteckbarriere

Grenzfall : $\tilde{k}L \gg 1$, also "breite" Barriere

$\Rightarrow$ $e^{+\tilde{k}L}$ dominiert im Nenner $\Rightarrow$

$$T e^{ikL} \approx \underbrace{e^{-\tilde{k}L}}_{} \cdot \frac{-4iz}{(1-iz)^2} \qquad \left(z = \frac{k}{\tilde{k}}\right)$$

exponentiell abklingende "Tunnelamplitude",

mit $\tilde{k} = \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar}$

(also stärkeres Abklingen für kleinere Energien!)

Es gilt außerdem Allgemein :

$$|R|^2 + |T|^2 = 1$$

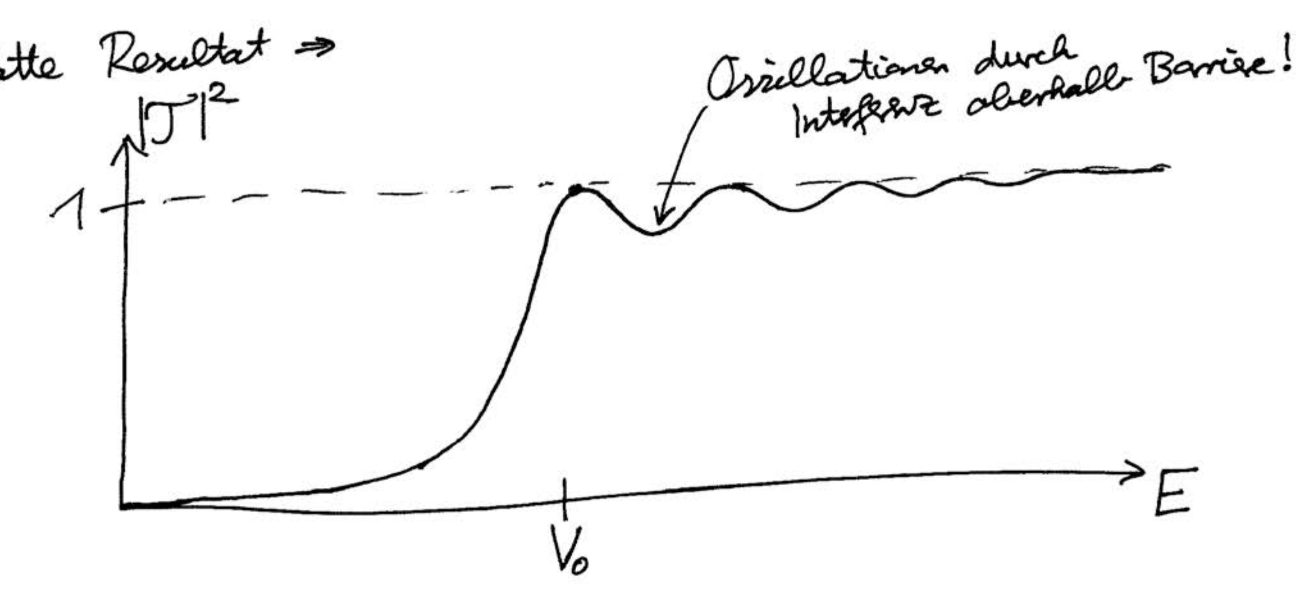
Wahrscheinlichkeitserhaltung !
(Teilchen transmittiert oder reflektiert)

[Check hier : $\Rightarrow \ldots \Rightarrow \checkmark$]

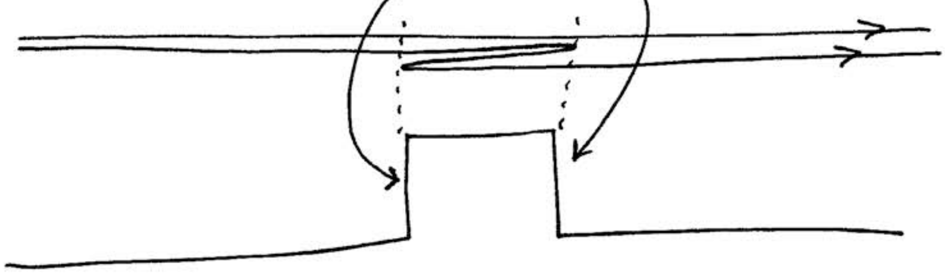
---

für Energien $E > V_0$ (oberhalb Barriere):
formal $\tilde{k} \in i\mathbb{R}$

Plotte Resultat $\Rightarrow$

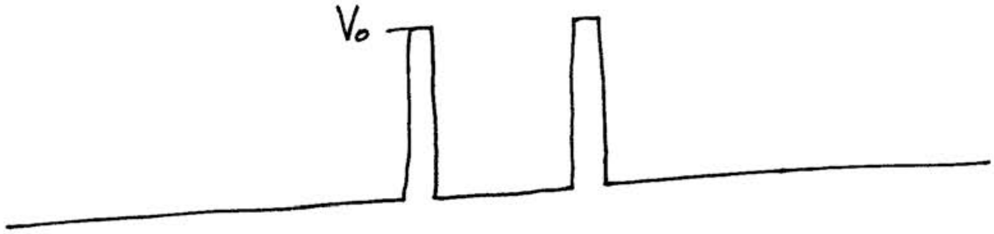


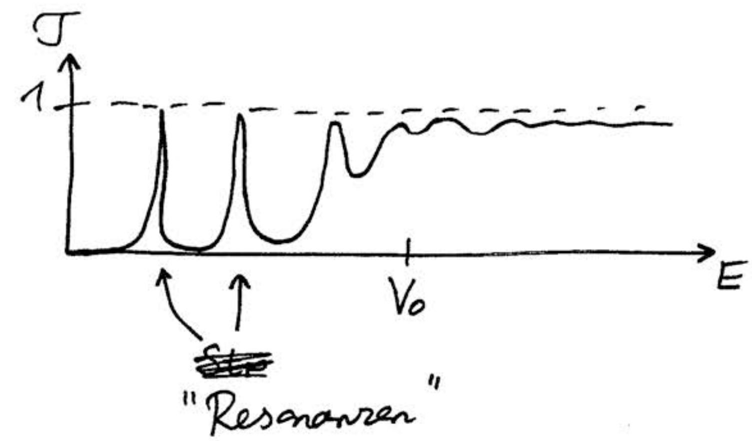
Sogar oberhalb der Barriere können Wellen an der plötzlichen Flanke von $V(x)$ reflektiert werden!



$\Rightarrow$ Interferenz!

Noch viel stärker ausgeprägt für Potentiale der folgenden Form:





$$\mathcal{R} = \frac{4iz}{(1+iz)^2 e^{-\alpha} - (1-iz)^2 e^{\alpha}} \cdot \frac{1}{2} \cdot \{ (1+iz) e^{-\alpha} + (1-iz) e^{\alpha} \} - 1$$

$$= \frac{2iz [\quad + \quad] - [(1+iz)^2 e^{-\alpha} - (1-iz)^2 e^{\alpha}]}{\cdots}$$

$$\cancel{= (1+iz)(2iz - (1+iz))}$$

$$= \frac{[(iz)^2 - 1] e^{-\alpha} - [(iz)^2 - 1] e^{\alpha}}{\cdots}$$

$$= (1+z^2) \frac{e^{\alpha} - e^{-\alpha}}{\cdots}$$

(Nebenrechnung: Check $|\mathcal{T}|^2 + |\mathcal{R}|^2 = 1$)

$$\mathcal{T} e^{ikL} = \frac{4iz}{\cdots}$$

$$\Rightarrow |\mathcal{R}|^2 + |\mathcal{T}|^2 =$$

$$= \frac{(4z)^2 + (1+z^2)^2 (e^{\alpha} - e^{-\alpha})^2}{[\cdots]^2} = 1 \checkmark$$

☺

$$[\cdots]^2 = (1+z^2)^2 e^{-2\alpha} + (1+z^2)^2 e^{2\alpha} - [\underbrace{(1-iz)^4 + (1+iz)^4}_{2 - z^2 \cdot 2 \cdot \underbrace{\binom{4}{2}}_{\frac{4 \cdot 3}{2}} + 2z^4}]$$

$$(1+z^2)^2 \cdot (-2) + (4z)^2$$

$$= -2 - 4z^2 - 2z^4 + 16z^2$$

$$= -2 + 12z^2 - 2z^4$$

6. Störungsrechnung

<u>Idee:</u> Lösung (der SGl) zu $\hat{H}_0$ sei bekannt

$\Rightarrow$ löse $H = \hat{H}_0 + \hat{V}$, mit "kleiner Störung" $\hat{V}$

(z.B.: schwaches elektrisches Feld etc.)

6.1 Zeitunabhängige Störungsrechnung

Annahme:

Wir haben bereits

$$\hat{H}_0 |\phi_n^{(0)}\rangle = E_n^{(0)} |\phi_n^{(0)}\rangle$$

"ungestörte Eigenzustände" "ungestörte Eigen-energien"

(Beispiel:

<u>Wenn</u> sich die Wellenfkt. nicht ändern <u>würde</u>, dann würde der Energie-Erwartungswert sich wie folgt ändern:

$$\langle\phi_n^{(0)}|\hat{H}|\phi_n^{(0)}\rangle = E_n^{(0)} + \underbrace{\langle\phi_n^{(0)}|\hat{V}|\phi_n^{(0)}\rangle}_{\text{"Korrektur zur Energie"}}$$
)

$\curvearrowright$ Systematisches Vorgehen?

Taylor-Reihe!

Ansatz: $\hat{H} = \hat{H}_0 + \varepsilon\hat{V}$, $\varepsilon \to$ "klein"

$\Rightarrow$ entwickle alles in Potenzen von ε

$$E_n = E_n^{(0)} + \underbrace{\varepsilon E_n^{(1)}}_{\text{"Korrektur erster Ordnung"}} + \underbrace{\varepsilon^2 E_n^{(2)}}_{\text{"zweite Ordnung"}} + \dots$$

$$|\phi_n\rangle = |\phi_n^{(0)}\rangle + \varepsilon|\phi_n^{(1)}\rangle + \dots$$

$\rightsquigarrow$ einsetzen in $\quad \hat{H}|\phi_n\rangle \overset{!}{=} E_n|\phi_n\rangle$

$$\Rightarrow \left(\hat{H}_0 + \varepsilon\hat{V}\right)\left(|\phi_n^{(0)}\rangle + \varepsilon|\phi_n^{(1)}\rangle + \dots\right) = \left(E_n^{(0)} + \varepsilon E_n^{(1)} + \dots\right)\left(|\phi_n^{(0)}\rangle + \dots\right)$$

$\rightsquigarrow$ Ordne nach Potenzen von ε:

$$\varepsilon^0: \quad \hat{H}_0|\phi_n^{(0)}\rangle \overset{!}{=} E_n^{(0)}|\phi_n^{(0)}\rangle \quad \checkmark \quad \text{(bereits erfüllt)}$$

$$\varepsilon^1: \quad \hat{H}_0|\phi_n^{(1)}\rangle + \hat{V}|\phi_n^{(0)}\rangle = E_n^{(0)}|\phi_n^{(1)}\rangle + E_n^{(1)}|\phi_n^{(0)}\rangle$$

von links: $\langle\phi_n^{(0)}| \Rightarrow$ verwende $\langle\hat{H}_0\phi_n^{(0)}| = E_n^{(0)}\langle\phi_n^{(0)}|$

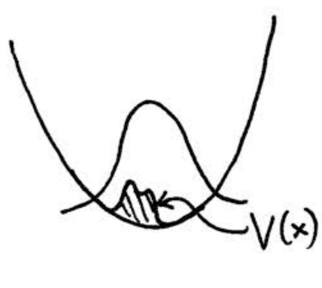
$$\cancel{E_n^{(0)}\langle\phi_n^{(0)}|\phi_n^{(1)}\rangle} + \langle\phi_n^{(0)}|\hat{V}|\phi_n^{(0)}\rangle$$

$$= \cancel{E_n^{(0)}\langle\phi_n^{(0)}|\phi_n^{(1)}\rangle} + E_n^{(1)}$$

$\Rightarrow$ erste Energiekorrektur

$$\boxed{E_n^{(1)} = \underbrace{\langle\phi_n^{(0)}|\hat{V}|\phi_n^{(0)}\rangle}_{\text{Erwartungswert des Stör-Operators}}}$$

Bsp.: Potential



$$\Rightarrow E_n^{(1)} = \int dx\, |\phi_n^{(0)}(x)|^2\, V(x)$$

Erste Korrektur zur Wellenfunktion?

von links:

$$\langle \phi_m^{(0)} | \quad \text{mit } m \neq n$$

$\Rightarrow \ldots \Rightarrow$

$$E_m^{(0)} \langle \phi_m^{(0)} | \phi_n^{(1)} \rangle + \langle \phi_m^{(0)} | \hat{V} | \phi_n^{(0)} \rangle$$

$$= E_n^{(0)} \langle \phi_m^{(0)} | \phi_n^{(1)} \rangle + E_n^{(1)} \underbrace{\langle \phi_m^{(0)} | \phi_n^{(0)} \rangle}_{\equiv 0 \text{ (wg. Orthogonalität)}}$$

$$\Rightarrow \boxed{\langle \phi_m^{(0)} | \phi_n^{(1)} \rangle = \frac{\langle \phi_m^{(0)} | \hat{V} | \phi_n^{(0)} \rangle}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}}} \quad (m \neq n)$$

"Übergangs-matrixelement"

"Energie-Nenner"

Außerdem ist $\langle \phi_n^{(0)} | \phi_n^{(1)} \rangle = 0$, das folgt aus der Normierungsbed. $\langle \phi_n | \phi_n \rangle \stackrel{!}{=} 1$.

Bem.:
Problem, wenn $E_n^{(0)} = E_m^{(0)}$, also entartete Energie-Eigenwerte $\Rightarrow$ s.u.!
(hier: Annahme, das sei nicht der Fall)

Zweite Ordnung

ε^2: $\ldots\ldots = \ldots\ldots$

verwende 1. Ordnung $\Rightarrow \ldots \Rightarrow$

$$\boxed{E_n^{(2)} = \sum_{m \neq n} \frac{|\langle \phi_m^{(0)} | \hat{V} | \phi_n^{(0)} \rangle|^2}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}}}$$

Energie-Änderung wegen Veränderung der Wellenfunktion! (1. Ordn.)
Sozusagen: "Anpassung" an das Potential!

$\Rightarrow$ Beim Grundzustand ist diese Korrektur immer negativ!

Wichtiger Fall:

<u>Wenn</u> es entartete Energie-Eigenräume (von $\hat{H}_0$) gibt, dann muß zuerst $\hat{V}$ in diesen Unterräumen diagonalisiert werden, bevor die normale Störungsrechnung ausgehend von dieser Basis angewendet wird!

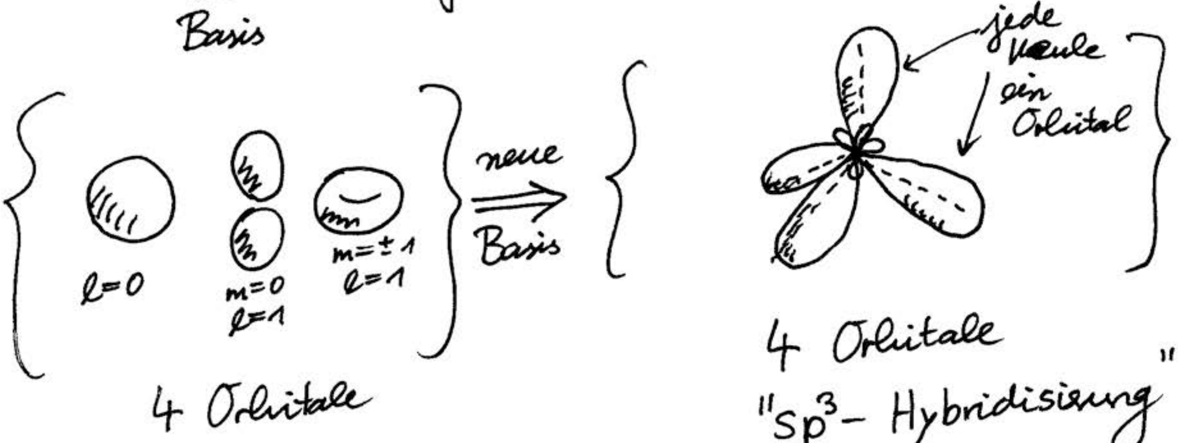
Also: <u>Wähle</u> Unterraum-Basis jeweils so, dass $\langle \phi_m^{(0)} | \hat{V} | \phi_n^{(0)} \rangle = 0$ für alle m, n, bei denen $E_n^{(0)} = E_m^{(0)}$

$\Rightarrow$ ~~Diagon~~ Finde Eigenvektoren dieser Matrix (von $\hat{V}$) in den jeweiligen Unterräumen!

Bsp.: Atomorbitale

2s, 2p ($m = 0, \pm 1$) alle entartet

$\Rightarrow$ für Atom in Potential $\hat{V}$ mit Tetraeder-Symmetrie, wähle neue Basis



4 Orbitale

4 Orbitale

"sp^3-Hybridisierung"

6.2 Zeitabhängige Störungsrechnung

$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V} \Rightarrow$ Zeitentwicklung einer beliebigen Wellenfunktion?

~~Lsg~~ Suche

$$|\Psi(t)\rangle = \sum_n c_n(t) \underbrace{|\phi_n^{(0)}\rangle}_{\substack{\parallel \\ |n\rangle}} \cdot e^{-\frac{i}{\hbar}E_n^{(0)}t}$$

als Lsg. zu

$$i\hbar \frac{d}{dt}|\Psi(t)\rangle = \hat{H}\,|\Psi(t)\rangle$$

$\Rightarrow$ Wir müssen die zeitabhängigen Koeffizienten $c_n(t)$ finden!

$|\Psi(t)\rangle$ Einsetzen $\Rightarrow \ldots \Rightarrow$

$$i\hbar\,\dot{c}_n(t) = \sum_m \langle n|\hat{V}|m\rangle c_m(t) \cdot e^{\frac{i}{\hbar}(E_n^{(0)}-E_m^{(0)})t}$$

(also $\dot{c}_n = 0$ für $\hat{V}=0$
$\Rightarrow$ dann ist $|\Psi(t)\rangle$ die normale Lsg. durch Entwicklung nach der Eigenbasis von $\hat{H}_0$)

$\Rightarrow$ formal:

$$c_n(t) = c_n(0) + \frac{1}{i\hbar}\int_0^t dt' \sum_m \langle n|\hat{V}|m\rangle c_m(t') e^{\frac{i}{\hbar}(E_n^{(0)}-E_m^{(0)})t'}$$

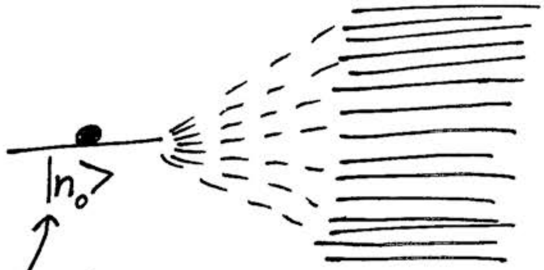
jetzt: Näherung $c_m(t') \approx c_m(0)$ unter dem Integral
($\Rightarrow$ wir erhalten die "erste Ordnung")

$\Rightarrow$

$$c_n(t) \approx c_n(0) + \frac{1}{i\hbar}\sum_m \langle n|\hat{V}|m\rangle c_m(0)\,\frac{e^{i\omega_{nm}t}-1}{i\omega_{nm}}$$

mit $\omega_{nm} \equiv \frac{1}{\hbar}(E_n^{(0)} - E_m^{(0)})$

Wichtiger Fall: Die Zustände $|m\rangle$ bilden ein "Kontinuum" (also jedenfalls $\omega_{nm} \ll \frac{1}{t}$ für benachbarte n, m)



Start hierin

$|\Psi(0)\rangle = |n_0\rangle$

z.B.: Streuung, mit $\left.\begin{array}{l}|n\rangle = |\vec{k}_0\rangle \\ |m\rangle = |\vec{k}'\rangle \\ \quad\quad \neq \vec{k}_0\end{array}\right\}$ ebene Wellen

Dann: Wahrscheinlichkeit, zur Zeit t in einem anderen Zustand zu sein?

$$\sum_{l \neq n_0} |c_l(t)|^2 \approx \frac{1}{\hbar^2} \sum_{l \neq n_0} |\langle l|\hat{V}|n_0\rangle|^2 \cdot \underbrace{\left|\frac{e^{i\omega_{ln_0}t} - 1}{i\omega_{ln_0}}\right|^2}_{\text{am größten bei } l \text{ mit } \text{"}\omega_{ln_0} \approx 0\text{"}}$$

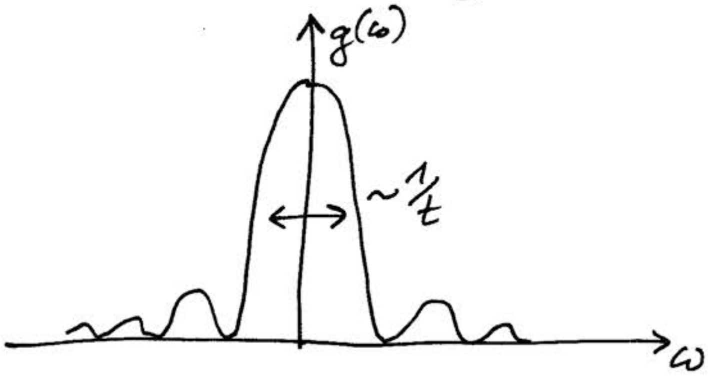
in obiger Formel: $n = l$, $m = n_0$

$\Rightarrow$ falls $|\langle ..|\hat{V}|..\rangle|^2$ eine glatte Funktion der Energie $E_l^{(0)}$ ist: verwende

$$\sum_l f(E_l^{(0)}) \approx \int dE \, \underbrace{D(E)}_{\substack{= \text{Zustände pro Energieintervall } dE \\ = \text{"Zustandsdichte"}}} f(E)$$

Verwende nun:

$$\left|\frac{e^{i\omega_{\ell n_0}t}-1}{i\omega_{\ell n_0}}\right|^2 = \underbrace{\frac{4\sin^2\left(\omega_{\ell n_0}\frac{t}{2}\right)}{\omega_{\ell n_0}^2}}_{\equiv\; g(\omega_{\ell n_0})}$$



sehr lokalisiert um $\omega \approx 0 \triangleq E = E_\ell^{(0)} \approx E_n^{(0)}$

Bedeutung: "Energie-Erhaltung", Streuung bevorzugt in Zustände, die mit $|n_0\rangle$ energiegleich sind!

Es ist $$\int d\omega\, \frac{4\sin^2(\omega\frac{t}{2})}{\omega^2} \underset{\uparrow}{=} 2t \underbrace{\int dy\, \frac{\sin^2(y)}{y^2}}_{\pi}$$

Subst.: $y = \frac{\omega t}{2}$

$\Rightarrow$ mit $\int dE \ldots = \hbar \int d\omega \ldots$

$$\boxed{\begin{aligned}&P(\text{„Streuung in andern Zustand"})\\ &\approx \underbrace{\frac{2\pi}{\hbar} D(E=E_{n_0}) \cdot |\langle \ell|\hat{V}|n_0\rangle|^2}_{\Gamma \,=\, \text{Streurate}} \cdot t \quad \text{wächst linear in der Zeit!}\end{aligned}}$$

"Fermis Goldene Regel"

Bem.: manchmal auch als $\Gamma_{\ell n_0} = \frac{2\pi}{\hbar} |\langle \ell|\hat{V}|n_0\rangle|^2\, \delta(E_\ell - E_{n_0})$

und dann: $\Gamma = \text{"}\sum_\ell\text{"}\, \Gamma_{\ell n_0} = \int dE_\ell$ —"—