Bish.: "Freie" Green'sche Funktion:

$$\hat{G}_0(z) = \frac{1}{z-\hat{H}_0}\ , \quad z \in \mathbb{C} \quad (\text{mit } z = E \pm i\varepsilon)$$

System ohne Streupotential

Verallgemeinerung: $\hat{G}(z) = \frac{1}{z-\hat{H}}\ , \quad \hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}$

„volle" Green'sche Funktion

Dyson-Gl.: $\hat{G}(z) = \hat{G}_0(z) + \hat{G}_0(z)\hat{V}\hat{G}(z)$ exakt

Ortsdarstellung $\Rightarrow$ Integralgleichung für $\langle \underline{r}|\hat{G}(z)|\underline{r}'\rangle$
$= G(\underline{r},\underline{r}';z)$

T-Matrix: $\hat{T}(z) = \hat{V} + \hat{T}(z)\hat{G}_0(z)\hat{V}$
$\Rightarrow \hat{G}(z) = \hat{G}_0(z) + \hat{G}_0(z)\hat{T}(z)\hat{G}_0(z)$

$\Rightarrow$ Gleichung für Streuzustände: $\boxed{|\psi_{\underline{k}}^{\pm}\rangle = |\underline{k}\rangle + \hat{G}^{\pm}(E)\hat{V}|\underline{k}\rangle}$
(folgt aus Lippmann-Schwinger-Gl.)

$\Rightarrow$ Streuamplitude:

$$\boxed{f^{+}(k\underline{e}_r,\underline{k}) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2}\langle k\underline{e}_r|\hat{T}^{+}(E)|\underline{k}\rangle}$$

exakt im asymptotischen Limes ($r \to \infty$)

(Vgl. mit Born'scher Näherung:
$$f^{+} = -\frac{m}{2\pi\hbar^2}\underbrace{\langle k\underline{e}_r|\hat{V}|\underline{k}\rangle}_{\hat{V}(\underline{q}) \text{ mit } \underline{q} = \underline{k} - k\underline{e}_r})$$

Weitere Eigenschaften der (vollen) Green'sche Funktion

a) Zusammenhang mit gebundenen Zuständen

Ausgangspunkt ist die Def.: $\hat{G}(z) = \frac{1}{z-\hat{H}}$

Annahme: $\hat{H}|n\rangle = E_n|n\rangle$

Eigenzustände

Eigenwerte (diskret)

$$\hat{G}(z) = \hat{G}(z)\,\hat{1} = \hat{G}(z) \underbrace{\sum_n |n\rangle\langle n|}_{\hat{1}} = \sum_n \frac{1}{z-\hat{H}} |n\rangle\langle n|$$

$$= \sum_n \frac{1}{z-E_n} |n\rangle\langle n| = \sum_n \frac{|n\rangle\langle n|}{z-E_n}$$

Ortsdarstellung:

$$\langle \underline{r}|\hat{G}(z)|\underline{r}'\rangle = G(\underline{r},\underline{r}';z)$$

$$= \sum_n \frac{\langle \underline{r}|n\rangle\langle n|\underline{r}'\rangle}{z-E_n} = \sum_n \frac{\phi_n(\underline{r})\phi_n^*(\underline{r}')}{z-E_n}$$

$\Rightarrow$ Singularitäten auf der reellen Achse (denn $E_n \in \mathbb{R}$)
(Pole)

Erinnerung: Zu einem einfachen Pol z_α einer komplexen Funktion $f(z)$ gehört ein Residuum

$$\mathrm{Res}_{z_\alpha} = \lim_{z \to z_\alpha} \left((z-z_\alpha) f(z) \right)$$

hier: Zu einem Pol bei der Energie E_n (nicht entartet) gehört das Residuum:

$$\mathrm{Res}_{E_n}\left(G(\underline{r},\underline{r}';z) \right) = \phi_n(\underline{r})\phi_n^*(\underline{r}')$$

liefert physikal. Bedeutung der Residuen

(speziell $\underline{r}'=\underline{r}$: $\mathrm{Res}_{E_n} = |\phi_n(\underline{r})|^2$

Wahrscheinlichkeitsdichte!

b) Zusammenhang Green'sche Funktion $\Leftrightarrow$ Zustandsdichte

Definition: lokale Zustandsdichte

$$\nu(\underline{r},E) = \sum_n \delta(E-E_n)\, |\phi_n(\underline{r})|^2$$

E_n nicht-entartete Eigenwerte.

$\Rightarrow$ Information darüber, wieviele Zustände mit Energie E sich im System befinden, gewichtet mit der Wahrsch.-dichte, dass sich ein Teilchen im Zustand $|n\rangle$ am Ort $\underline{r}$ befindet.

Globale Zustandsdichte (räuml. Mittelung von der lokalen Zustandsdichte)

$$\nu(E) = \int d\underline{r}\; \nu(\underline{r},E) = \sum_n \delta(E-E_n)$$

(benutzt: $\int d\underline{r}\, |\phi_n(\underline{r})|^2 = 1$

Zusammenhang zur Green'schen Funktion

$$G^+(\underline{r},\underline{r};z) = \sum_n \frac{\phi_n(\underline{r})\phi_n^*(\underline{r})}{z-E_n} \qquad \text{mit } z = E+i\varepsilon$$

(setze $\underline{r}' = \underline{r}$)

$$= \int d\hat{E} \sum_n \delta(\hat{E}-E_n) \frac{\phi_n(\underline{r})\phi_n^*(\underline{r})}{z-\hat{E}}$$

$$G(\underline{r},\underline{r};z) = \int d\hat{E} \frac{\nu(\underline{r},\hat{E})}{z-\hat{E}} \longleftarrow \text{lokale Zustandsdichte}$$

benutze die Dirac-Identität

$$\frac{1}{z-z_0 \pm i\varepsilon} = P\left(\frac{1}{z-z_0}\right) \mp i\pi\,\delta(z-z_0) \quad ⊛$$

Hauptwert (~~...~~ reell!)

$$\boxed{\text{Hauptwert } P\int_{-\infty}^{\infty} dx \frac{1}{x} = \lim_{\eta\to 0}\left(\int_{-\infty}^{-\eta} dx \frac{1}{x} + \int_{\eta}^{\infty} dx \frac{1}{x}\right)}$$

$$\Rightarrow G^+(\underline{r},\underline{r};z) = P\left(\int d\hat{E} \frac{\nu(\underline{r},\hat{E})}{E-\hat{E}}\right) \mp i\pi \int d\hat{E}\, \nu(\underline{r},\hat{E})\, \delta(E-\hat{E})$$

$$= \underbrace{P(\ldots)}_{\text{reell!}} \mp i\pi\, \nu(\underline{r},E) \qquad \text{Imaginärteil durch lokale Zustandsdichte bestimmt}$$

$$\Rightarrow \operatorname{Im} G(\underline{r},\underline{r},z) = -\pi\, \nu(\underline{r},E)$$

Globale Zustandsdichte

$$\nu(E) = \int d\underline{r}\ \nu(\underline{r}, E)$$

$$= -\frac{1}{\pi} \int d\underline{r}\ \mathrm{Im}\ G^{+}(\underline{r}, \underline{r}; z)$$

Zustandsdichte ist zentral z.B. zur Berechnung statistischer Eigenschaften!

III.5. Zeitabhängige Störungstheorie

$\Rightarrow$ Beschreibung zeitabhängiger Streuvorgänge, Übergangswahrscheinlichkeiten

Ausgangspunkt:

Zeitabhängige Schrödinger-Gl. (SG)

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle = \hat{H} |\psi(t)\rangle$$

i.A. ist jetzt $\hat{H} = \hat{H}(t)$
$= \hat{H}_0 + \hat{V}(t)$
(Störpotential)

Zustand zur Zeit t

$$|\psi(t)\rangle = \hat{U}(t, t_0) |\psi(t_0)\rangle$$

Zeitentwicklungsoperator ("Propagator")
unitär

es gilt (für Konsistenz mit SG)

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \hat{U}(t,t_0) = \hat{H}\,\hat{U}(t,t_0) \quad , \quad \hat{U}(t_0,t_0) = \hat{1}$$

Falls speziell $\hat{H}$ zeitunabhängig $\Rightarrow \hat{U}(t,t_0) = e^{-i/\hbar \hat{H}(t-t_0)}$

Formulierung im <u>Wechselwirkungsbild (Dirac-Bild)</u>

s. auch TP II und Einführung dieser VL

Definiere Dirac-Operatoren über

$$\circledast \quad \hat{A}_D(t) = e^{i/\hbar \hat{H}_0 t}\, \hat{A}_S\, e^{-i/\hbar \hat{H}_0 t}$$

$\hat{A}_S$ — Operator im Schrödingerbild

$$|\psi_D(t)\rangle = e^{i/\hbar \hat{H}_0 t}\, |\psi(t)\rangle$$

$|\psi(t)\rangle$ — Zustand im Schrödingerbild

Zeitentwicklungsoperator im Dirac-Bild

$$\hat{U}_D(t,t_0) = e^{i/\hbar \hat{H}_0 t}\, \underbrace{\hat{U}(t,t_0)}_{\text{Schrödinger-Propagator}}\, e^{-i/\hbar \hat{H}_0 t_0} \quad \text{(Definition)}$$

Dynamik:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \hat{U}_D(t,t_0) = i\hbar\, \tfrac{i}{\hbar} \hat{H}_0\, e^{i/\hbar \hat{H}_0 t}\, \hat{U}(t,t_0)\, e^{-i/\hbar \hat{H}_0 t_0}$$

$$+\, i\hbar\, e^{i/\hbar \hat{H}_0 t}\, \frac{d}{dt} \hat{U}(t,t_0)\, e^{-i/\hbar \hat{H}_0 t_0}$$

$$= -\hat{H}_0 e^{i/\hbar \hat{H}_0 t} \hat{U}(t,t_0) e^{-i/\hbar \hat{H}_0 t_0}$$

$$+ e^{i/\hbar \hat{H}_0 t} (\hat{H} \, \hat{1} \, \hat{U}(t,t_0)) e^{-i/\hbar \hat{H}_0 t_0}$$

beschreibt Dynamik von $\hat{U}$ im Schrödingerbild

$$= -\hat{H}_0 \hat{U}_D(t,t_0) + e^{i/\hbar \hat{H}_0 t} \hat{H} \underbrace{e^{-i/\hbar \hat{H}_0 t} e^{+i/\hbar \hat{H}_0 t}}_{\hat{1}} \hat{U}(t,t_0) e^{-i/\hbar \hat{H}_0 t_0}$$

$$= -\hat{H}_0 \hat{U}_D(t,t_0) + \hat{H}_D(t) \hat{U}_D(t,t_0)$$

mit $\hat{H}_D(t) = e^{i/\hbar \hat{H}_0 t} \hat{H} e^{-i/\hbar \hat{H}_0 t}$.

Hamilton im Schrödingerbild

beachte:

$$\hat{H}_D(t) = e^{i/\hbar \hat{H}_0 t} (\hat{H}_0 + \hat{V}(t)) e^{-i/\hbar \hat{H}_0 t}$$

$$= e^{i/\hbar \hat{H}_0 t} \hat{H}_0 e^{-i/\hbar \hat{H}_0 t} + e^{i/\hbar \hat{H}_0 t} \hat{V}(t) e^{-i/\hbar \hat{H}_0 t}$$

$$= \hat{H}_0 \hat{1} + \hat{V}_D(t)$$

$$\Rightarrow \boxed{i\hbar \frac{d}{dt} \hat{U}_D(t,t_0) = \hat{V}_D(t) \hat{U}_D(t,t_0)} \quad (*)$$

(außerdem: $i\hbar \frac{d}{dt} |\psi_D(t)\rangle = \hat{V}_D(t) |\psi_D(t)\rangle$

und $|\psi_D(t)\rangle = \hat{U}_D(t,t_0)|\psi_D(t_0)\rangle$)

Formale Darstellung von $\hat{U}_D(t,t_0)$ durch Integration und Iteration von ⊛

$$\frac{d}{dt}\hat{U}_D(t,t_0) = \frac{1}{i\hbar}\hat{V}_D(t)\,\hat{U}_D(t,t_0) = -\frac{i}{\hbar}\hat{V}_D(t)\hat{U}_D(t,t_0)$$

$$\Rightarrow \hat{U}_D(t,t_0) = \underbrace{\hat{U}_D(t_0,t_0)}_{1} - i\int_{t_0}^{t} dt_1\, \hat{V}_D(t_1)\hat{U}_D(t_1,t_0)$$

$$= 1 - i\int_{t_0}^{t} dt_1\, \hat{V}_D(t_1)\,1 + (-i)^2\int_{t_0}^{t} dt_1\int_{t_0}^{t_1} dt_2\, \hat{V}_D(t_1)\hat{V}_D(t_2)$$

(*)

$$+ \ldots$$

$$\hat{U}_D(t,t_0) = 1 + \sum_{n=1}^{\infty}(-i)^n\int_{t_0}^{t} dt_1\int_{t_0}^{t_1} dt_2 \ldots \int_{t_0}^{t_{n-1}} dt_n\, \hat{V}_D(t_1)\hat{V}_D(t_2)\ldots\hat{V}_D(t_n)$$

III. 5. 1. Zeitunabhängiges Potential

also $\hat{V}(t) = V = \text{const}$

Betrachte Gl. (*), vertauscht die Produkte von $\hat{V}_D$

$$\hat{V}_D(t_1)\hat{V}_D(t_2) = e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}_0 t_1}\hat{V}e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}_0 t_1}e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}_0 t_2}\hat{V}e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}_0 t_2}$$
$$= e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}_0 t_1}\hat{V}e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}_0(t_1-t_2)}\hat{V}e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}_0 t_2}$$

analog für 3-er Produkt

$$\hat{V}_D(t_1)\hat{V}_D(t_2)\hat{V}_D(t_3) = e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}_0 t_1}\hat{V}e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}_0(t_1-t_2)}\hat{V}e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}_0(t_2-t_3)}\cdot\hat{V}e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}_0 t_3}$$

Beachte: In den Integralen in (*)
gilt $t_2 \leq t_1$, $t_3 \leq t_2$, ...

Das können wir formal durch Einführen von Stufenfunktionen in den Integralen berücksichtigen:

z.B. Term 2. Ordnung in V_D:

$$A = (-i)^2 \int_{t_0}^{t} dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2\, \hat{V}_D(t_1)\hat{V}_D(t_2)$$
$$= (-i)^2 \int_{t_0}^{t} dt_1 \int_{t_0}^{t} dt_2\, e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}_0 t_1}\hat{V}e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}_0(t_1-t_2)}\Theta(t_1-t_2)\cdot\hat{V}e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}_0 t_2}.$$

mit $\Theta(x) = \begin{cases} 1, & x > 0 \\ 0, & x < 0 \end{cases}$

Führe:
$$\hat{G}_0^+(t) = -i\, e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}_0 t}\,\Theta(t)$$

$$\Rightarrow A = -i \int_{t_0}^{t} dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 \, e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}_0 t_1} \, \hat{V} \hat{G}_0^+(t_1 - t_2) \hat{V} \, e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}_0 t_2}$$

im Schrödingerbild

analog können wir auch die höheren Terme durch Produkte ~~von~~ der Form $\hat{V}\hat{G}_0^+\hat{V}\ldots$ ausdrücken!

Es gilt: Die Funktion $\hat{G}_0^+(t)$ hat sehr engen Bezug zur früher eingeführten Funktion $\hat{G}_0^+(E)$ in der zeitunabhängigen Störungstheorie

betrachte dazu die Fouriertransformierte

$$\hat{G}_0^+(t) = \frac{1}{2\pi} \int d\omega \, e^{-i\omega t} \, \hat{G}_0^+(\omega)$$

es gilt: $\hat{G}_0^+(\omega) = \int dt \, \hat{G}_0^+(t) e^{+i\omega t}$

(Rück-Trafo)

$$= \frac{1}{\omega + i\varepsilon - \hat{H}_0/\hbar}$$