

Woh: "freie" Green'sche Funktion:

$$\hat{G}_0(z) = \frac{1}{z - H_0}, \quad z \in \mathbb{C} \quad (\text{mit } z = E \pm i\epsilon)$$

System ohne Störung

Verallgemeinerung:  $\hat{G}(z) = \frac{1}{z - H}, \quad H = H_0 + V$

"volle" Green'sche Funktion

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

Operatorstellung  $\rightarrow$  Integralgleichung für  $\langle n | \hat{G}(z) | m \rangle$   
 $= G(n, m; z)$

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:  
 (folgt aus  
 Lippmann-Schwinger-Gl.)

$$| \psi_{\underline{k}}^{\pm} \rangle = | \underline{k} \rangle + \hat{G}_0^{\pm}(E) \hat{V} | \underline{k} \rangle$$

$\Rightarrow$  Streuamplitude:

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

erhält im asymptotischen Limes ( $r \rightarrow \infty$ )

(Vgl. mit Born'sch Näherung:

$$f^+ = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \langle \underline{k}_{\text{out}} | \hat{V} | \underline{k} \rangle$$

$\hat{V}(q)$  mit  $q = \underline{k} - \underline{k}_{\text{out}}$

Weitere Eigenschaften der (vollen) Green'schen Funktion

a) Zusammenhang mit gekunden Zuständen

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

Annahme:  $\hat{H}|n\rangle = E_n|n\rangle$   
 (Eigenwerte (diskret)  
 Eigenzustände)

$$\begin{aligned} \hat{G}(z) &= \hat{G}(z) \hat{1} = \hat{G}(z) \sum_n |n\rangle\langle n| = \sum_n \frac{1}{z - E_n} |n\rangle\langle n| \\ &= \sum_n \frac{1}{z - E_n} |n\rangle\langle n| = \sum_n \frac{|n\rangle\langle n|}{z - E_n} \end{aligned}$$

Ortsdarstellung:

$$\begin{aligned} \langle n | \hat{G}(z) | n' \rangle &= G(n, n'; z) \\ &= \sum_n \frac{\langle n | n \rangle \langle n | n' \rangle}{z - E_n} = \sum_n \frac{\phi_n(n) \phi_n(n')}{z - E_n} \end{aligned}$$

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

Erinnerung: Zu einem einfachen Pol  $z_0$  einer komplexen Funktion  $f(z)$  gehört ein Residuum

$$\text{Res}_{z_0} = \lim_{z \rightarrow z_0} ((z - z_0) f(z))$$

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

$$\text{Res}_{E_n}(G(\underline{r}, \underline{r}'; z)) = \Phi_n(\underline{r}) \Phi_n(\underline{r}')$$

hat physikal. Bedeutung der Residuen

(speziell  $\underline{r}' = \underline{r}$  :  $\text{Res}_{E_n} = |\Phi_n(\underline{r})|^2$   
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-entartet  
Eigenschaft

$\Rightarrow$  Information darüber, wieviele Zustände mit Energie  $E$  sich im System befinden, gemittelt 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

$$G^+(\Omega, \Omega; z) = \sum_n \frac{\Phi_n(\Omega) \Phi_n^*(\Omega)}{z - E_n} \quad \text{mit } z = E + i\epsilon$$

(setze  $\Omega' = \Omega$ )

$$= \int d\tilde{E} \sum_n \delta(\tilde{E} - E_n) \frac{\Phi_n(\Omega) \Phi_n^*(\Omega)}{z - \tilde{E}}$$

$$G(\Omega, \Omega; z) = \int d\tilde{E} \frac{v(\Omega, \tilde{E})}{z - \tilde{E}} \leftarrow \text{lokale Zustandsdichte}$$

benutze die Dirac-Idealität

$$\frac{1}{z - z_0 \pm i\epsilon} = \mathcal{P} \left( \frac{1}{z - z_0} \right) \mp i\pi \delta(z - z_0) \quad \text{⊗}$$

Hauptwert  
(~~reell~~ reell!)

$$\mathcal{P} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{x} = \lim_{\eta \rightarrow 0} \left( \int_{-\infty}^{-\eta} \frac{1}{x} + \int_{\eta}^{\infty} \frac{1}{x} \right)$$

$$\Rightarrow G^+(\Omega, \Omega; z) = \mathcal{P} \left( \int d\tilde{E} \frac{v(\Omega, \tilde{E})}{z - \tilde{E}} \right) \mp i\pi \int d\tilde{E} v(\Omega, \tilde{E}) \delta(\tilde{E} - E)$$

$$= \mathcal{P}(\dots) \mp i\pi v(\Omega, E) \quad \begin{array}{l} \text{imaginär!} \\ \text{durch lokale} \\ \text{Zustandsdichte} \\ \text{bestimmt} \end{array}$$

$$\Rightarrow \text{Im } G(\Omega, \Omega; z) = -\pi v(\Omega, E)$$

Globale Zustandsdichte

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

$$= -\frac{1}{\pi} \int_{\text{z.B.}} d\underline{r} \operatorname{Im} G^+(\underline{r}, \underline{r}; E)$$

Zustandsdichte ist zentral zur Berechnung statistischer Eigenschaften!

### III, 5. Zeitabhängige Störungstheorie

→ Beschreibung zeitabhängiger Störungen,  
Übergangswahrscheinlichkeiten

Ausgangspunkt:

Zeitabhängige Schrödinger-Gl. (SG)

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

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

(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)

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

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

Formulierung im Wechselwirkungsbild (Dirac-Bild)

s. auch TP II und Einführung dieser VL

Definiere Dirac-Operatoren über

$$\hat{A}_D(t) = e^{i\frac{t}{\hbar} \hat{H}_0} \hat{A}_S e^{-i\frac{t}{\hbar} \hat{H}_0}$$

Operate im Schrödingerbild

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

Zustand im Diracbild

Zeitentwicklung operata im Dirac-Bild

$$\hat{U}_D(t, t_0) = e^{i\frac{t}{\hbar} \hat{H}_0} \vec{U}(t, t_0) e^{-i\frac{t_0}{\hbar} \hat{H}_0} \quad (\text{Definita})$$

Schrödinger-Propagator

Dynamik:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \hat{U}_D(t, t_0) = i\hbar \frac{1}{\hbar} \hat{H}_0 e^{i\frac{t}{\hbar} \hat{H}_0} \vec{U}(t, t_0) e^{-i\frac{t}{\hbar} \hat{H}_0} + i\hbar e^{i\frac{t}{\hbar} \hat{H}_0} \frac{d}{dt} \vec{U}(t, t_0) e^{-i\frac{t}{\hbar} \hat{H}_0}$$

$$\begin{aligned}
&= \hat{H}_0 e^{i\hat{H}_0 t/\hbar} \hat{U}(t, t_0) e^{-i\hat{H}_0 t/\hbar} \\
&+ e^{i\hat{H}_0 t/\hbar} \underbrace{\left( \hat{H}_1 \hat{U}(t, t_0) \right)}_{\hat{V}} e^{-i\hat{H}_0 t/\hbar} \quad \left| \begin{array}{l} \text{bereits} \\ \text{Dynamik von} \\ \hat{U} \text{ im} \\ \text{Schrödinger-Bild} \end{array} \right. \\
&= -\hat{H}_0 \hat{U}_D(t, t_0) + e^{i\hat{H}_0 t/\hbar} \hat{H}_1 e^{-i\hat{H}_0 t/\hbar} e^{+i\hat{H}_0 t/\hbar} \hat{U}(t, t_0) e^{-i\hat{H}_0 t/\hbar} \\
&= -\hat{H}_0 \hat{U}_D(t, t_0) + \hat{H}_D(t) \hat{U}_D(t, t_0)
\end{aligned}$$

$$\text{mit } \hat{H}_D(t) = e^{i\hat{H}_0 t/\hbar} \hat{H}_1 e^{-i\hat{H}_0 t/\hbar}$$

↑  
Hamiltonian im  
Schrödinger-Bild

beachte:

$$\begin{aligned}
\hat{H}_D(t) &= e^{i\hat{H}_0 t/\hbar} (\hat{H}_0 + \hat{V}(t)) e^{-i\hat{H}_0 t/\hbar} \\
&= e^{i\hat{H}_0 t/\hbar} \hat{H}_0 e^{-i\hat{H}_0 t/\hbar} + e^{i\hat{H}_0 t/\hbar} \hat{V}(t) e^{-i\hat{H}_0 t/\hbar} \\
&= \hat{H}_0 \mathbb{1} + \hat{V}_D(t)
\end{aligned}$$

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

$$(\text{anforderung: } i\hbar \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle_D = \hat{V}_D(t) |\psi(t)\rangle_D)$$

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

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

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

$$\begin{aligned} \Rightarrow \hat{U}_D(t, t_0) &= \underbrace{\hat{U}_D(t_0, t_0)}_1 - i \int_{t_0}^t dt_1 \hat{V}_D(t_1) \hat{U}_D(t, t_1) \\ &= 1 - i \int_{t_0}^t dt_1 \hat{V}_D(t_1) 1 + (-i)^2 \int_{t_0}^t dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 \hat{V}_D(t_1) \hat{V}_D(t_2) \\ &\quad + \dots \end{aligned}$$

$\textcircled{*}$

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

### III 5.1. Zeitunabhängiges Potential

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

Betrachte  $\textcircled{*}$ , Verliert die Produkte von  $\hat{V}_D$



$$\begin{aligned} \vec{V}_D(t_1) \vec{V}_D(t_2) &= e^{i\hat{H}_0 t_1} \vec{V} e^{-i\hat{H}_0 t_1} e^{i\hat{H}_0 t_2} \vec{V} e^{-i\hat{H}_0 t_2} \\ &= e^{i\hat{H}_0 t_1} \vec{V} e^{-i\hat{H}_0(t_1-t_2)} \vec{V} e^{-i\hat{H}_0 t_2} \end{aligned}$$

analog für 3-er Produkt

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

Beachte: In den Integralen in  $\mathcal{G}$

$$\text{gilt } t_2 \leq t_1, t_3 \leq t_2, \dots$$

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

z.B. Term 2. Ordnung in  $V_D$ :

$$\begin{aligned} A &= (-i)^2 \int_{t_0}^{t_1} dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 \vec{V}_D(t_1) \vec{V}_D(t_2) \\ &= (-i)^2 \int_{t_0}^{t_1} dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 e^{i\hat{H}_0 t_1} \vec{V} e^{-i\hat{H}_0(t_1-t_2)} \theta(t_1-t_2) \\ &\quad \cdot \vec{V} e^{-i\hat{H}_0 t_2} \end{aligned}$$

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

Teile:

$$G_0^+(\epsilon) = -i e^{i\hat{H}_0 \epsilon} \theta(\epsilon)$$

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

im Schwirgelsymbol

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

Es gilt: Die Funktion  $\hat{G}_0^+(\epsilon)$  hat sehr engen Bezug zur früher eingeführte Funktion  $\hat{G}_0^+(\epsilon)$  in der Zeitunabhängigen Störungstheorie

betrachte dazu die Fouriertransformierte

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

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

$$= \frac{1}{\omega + i\epsilon - \frac{\hbar}{\hbar}}$$