

Streuung und Störung

Kim Boström

Mai 1998

Inhaltsverzeichnis

1	Wie integriert man über Pole?	2
1.1	Physikalischer Bezug	6
2	Gestörter Hamiltonian	6
3	Störtheorie erster Ordnung	8
3.1	Abrupt eingeschaltete Störung	9
3.2	Langsam eingeschaltete Störung	9
3.3	Diskrete Übergänge	10
3.3.1	Harmonisch oszillierende Störung	10
3.3.2	Konstante Störung	11
3.3.3	Eine Energie-Zeit-Unschärfe	12
3.3.4	Linienbreiten und die Dauer von Sprüngen	13
3.3.5	Entartete Energieniveaus	14
4	Die C-Transformation	15
4.1	Definition	15
5	Die Resolvente	18
5.1	Spektralzerlegungen	22
5.2	Eigenschaften der Resolvente	25
5.3	Green-Operatoren	26
5.4	Møller-Operatoren	28
5.5	Lippmann-Schwinger-Gleichungen und Bornsche Reihe	30
5.6	S-Matrix	31
5.7	Zeitbild und Energiebild	32
5.8	Zusammenhang mit der Fourier-Transformation	33
5.9	Essenz	34

1 Wie integriert man über Pole?

Die Integration von Funktionen, die auf dem Integrationsweg Polstellen besitzen, bereitet gewisse Schwierigkeiten. Betrachten wir folgendes Integral:

$$I := \int_a^b dx f(x) \quad ; \quad a < x_0 < b \quad (1)$$

$$\text{mit} \quad f(x) = \frac{g(x)}{x - x_0} \quad (2)$$

wobei wir annehmen wollen, daß $g(x)$ als Funktion einer komplexen Variablen holomorph in einer Umgebung bei x_0 ist, jedoch dort keine Nullstelle besitzt.

Halten wir uns an die Definition des Lebesgue-Integrals, so gibt es das Integral nicht. Bei der Lebesgue-Integration wird der Integrand in einen rein positiven und einen rein negativen Teil zerlegt. Keines der beiden Teilintegrale existiert, weil die Integrale über die Treppenfunktionen, die die Teilfunktionen jeweils approximieren, um den Bereich der Polstelle herum gegen unendlich gehen. Also ist das Integral nichtexistent. Damit wollen wir uns nicht zufrieden geben. Wir können uns symmetrisch von beiden Seiten der reellen Achse an den Pol "herantasten" und erhalten den **Cauchy-Hauptwert** oder **Prinzipalwert** des Integrals:

$$\mathcal{P} \int_a^b dx \frac{g(x)}{x - x_0} := \lim_{\eta \rightarrow 0} \left\{ \int_a^{x_0 - \eta} dx \frac{g(x)}{x - x_0} + \int_{x_0 + \eta}^b dx \frac{g(x)}{x - x_0} \right\} \quad (3)$$

Wieder wollen wir die beiden Integrale im Lebesgue'schen Sinne berechnen. Diesmal haben wir Erfolg. Falls $g(x)$ im Integrationsintervall integrierbar ist, erhalten wir eine Lösung.

Wir nehmen uns die Funktion $f(x) = 1/x$ und schauen was passiert (siehe Abb. 1). Die Funktion hat einen einfachen Pol bei $x = 0$, ist in der Umgebung dieses Pols jedoch beliebig oft differenzierbar. Wir erhalten als Prinzipalwert des Integrals:

$$\mathcal{P} \int_a^b dx \frac{1}{x} = \lim_{\eta \rightarrow 0} \{ \ln |b| - \ln |\varepsilon| + \ln |\varepsilon| - \ln |a| \} \quad (4)$$

$$= \ln |b| - \ln |a| \quad (5)$$

Wir könnten damit zufrieden sein, die Integration über Polstellen hinweg stets mit der Prinzipalwert-Methode zu berechnen. Doch wir machen etwas anderes. Wir stellen uns vor, daß wir statt der reellen Integration eine komplexe Integration machen, wobei der Integrationsweg über die reelle Achse führt. Nun reicht es augenscheinlich nicht mehr, daß wir uns nur von *zwei* Seiten an die Polstelle heranpirschen können. Es muß auch möglich sein uns von *beliebiger* Seite zu nähern, also den Pol regelrecht einzukreisen. Tun wir

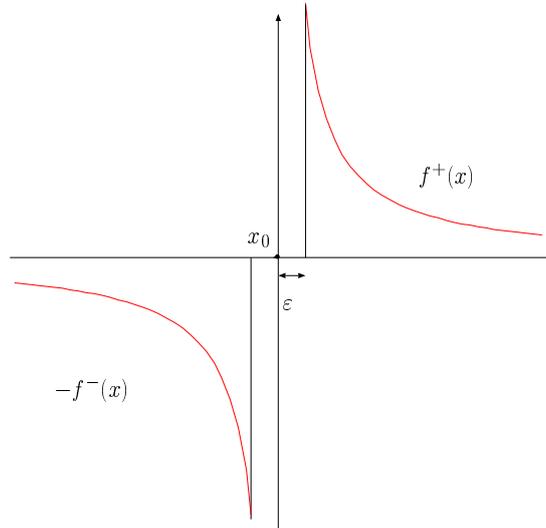


Abbildung 1: Prinzipalwert des Integrals der Funktion $1/x$

das zunächst von unten über einen Weg Γ^- , der aus dem Grenzwert eines Weges Γ_η^- über die untere Halbebene für $\eta \rightarrow 0$ hervorgeht (siehe Abb. 2). Dazu ist zu fordern, daß der Integrand $f(x)$ *analytisch fortsetzbar* ist auf die untere/obere komplexe Halbebene, je nachdem von welcher Seite wir uns an den Pol heranpirschen. Die Klasse der Funktionen, die diese Bedingung erfüllt, heißt **Hardy**-Klasse von oben/unten. Sie besteht aus reellen Funktionen, die Grenzfunktionen ihrer analytischen Fortsetzungen auf entweder die untere oder die obere komplexe Halbebene sind, wenn man den Imaginärteil des komplexen Arguments gegen Null gehen läßt. Etwas genauer lautet die Definition dieser Klassen:

$$H_\pm^2 := \left\{ f : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R} \mid f(x \pm i\eta) \in \mathbb{C} \text{ ist analytisch} \right. \quad (6)$$

$$\left. \text{mit } \lim_{\eta \rightarrow 0} f(x + i\eta) = f(x) \right. \quad (7)$$

$$\left. \text{und } \int_{-\infty}^{+\infty} dx |f(x \pm iy)|^2 < +\infty \text{ mit } y > 0 \right\} \quad (8)$$

Jetzt betrachten wir den Integrationsweg Γ^- , der aus einem Heranpirschen von der unteren Halbebene resultiert. Dies geht nur, wenn der Integrand $f \in H_-^2$ ist.

Das Integral zerfällt entlang Γ^- in mehrere Abschnitte:

$$\int_{\Gamma} dz f(z) = \int_a^{x_0-\eta} dx f(x) + \int_{x_0+\eta}^b dx f(x) + \int_{C_\eta} f(z) \quad (9)$$

$$\longrightarrow \mathcal{P} \int_a^b dx f(x) + i\pi \text{Res}_{x_0}(f(z)) \quad (10)$$

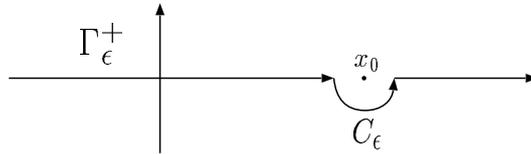


Abbildung 2: Näherung des Integrationsweges von unten an die Polstelle.

Die ersten beiden Terme ergänzen sich gerade zum Prinzipalwert des Integrals, während das Integral über den oberen Kreisbogen nach dem Cauchy-Integralsatz das Residuum liefert. Für unser spezielles f erhalten wir nun:

$$\int_{\Gamma^-} dz \frac{g(z)}{z - x_0} = \mathcal{P} \int_a^b dx f(x) + i\pi g(x_0) \quad (11)$$

Zu unserer Verblüffung erhalten wir einen *komplexen Wert*. Wenn wir dasselbe für einen Integrationsweg machen, der sich von *oben* nähert – wobei diesmal $f \in H_+^2$ zu fordern ist –, erhalten wir

$$\int_{\Gamma^+} dz \frac{g(z)}{z - x_0} = \mathcal{P} \int_a^b dx f(x) - i\pi g(x_0) \quad (12)$$

Es ist also absolut wichtig, in welcher Hardyklasse f ist. Veranschaulichen wir uns das wieder an der Funktion $1/x$. Wie wir auf der Abbildung 3 sehen, wo der Hauptzweig von $\ln z$ dargestellt ist, der qualitativ das Verhalten von Integralen über polstellenbehaftete Funktionen widerspiegelt, macht ein Schnitt entlang der negativen reellen Achse eine analytische Fortsetzung der Integralfunktion von f auf die gesamte komplexe Ebene ohne den Pol bei $z = 0$ unmöglich. Wenn wir uns dem Pol von unten nähern, landen wir an der oberen, im anderen Fall an der unteren Kante dieses Schnittes. Dementsprechend erhalten wir einen imaginären Anteil, je nachdem von wo wir uns dem Schnitt genähert haben. Wir müssen uns also für eine Lösung entscheiden, indem wir uns für eine Hardyklasse für f entscheiden.

Nun zeigen wir, daß das “Heranpirschen” des Integrationsweges von oben an den Pol dieselbe Auswirkung hat, als wenn sich stattdessen der Pol von oben an den Integrationsweg heranpirscht. Wir schreiben

$$\frac{1}{x - x_0 + i\eta} = \frac{x - x_0}{(x - x_0)^2 + \eta^2} - \frac{i\eta}{(x - x_0)^2 + \eta^2} \quad (13)$$

$$\rightarrow \frac{\mathcal{P}}{x - x_0} - i\pi\delta(x - x_0) \quad (14)$$

Dabei haben wir die Darstellung der δ -Funktion als Grenzwert einer Funktionenfolge ausgenutzt, bei der ein Parameter η gegen Null geht. Das Integral

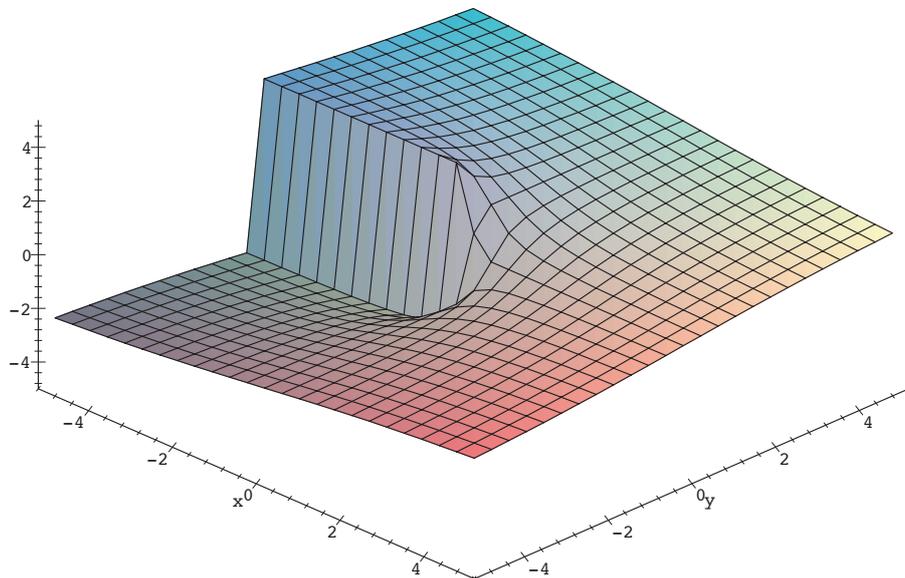


Abbildung 3: Der Imaginärteil der Funktion $\ln z$. Wir sehen einen Schnitt entlang der negativen reellen Achse, wo der Imaginäranteil um 2π springt.

über den ersten Term ergibt im Grenzfall gerade den Prinzipalwert und wir erhalten wir nun das gewünschte Resultat:

$$\lim_{\eta \rightarrow 0} \int_a^b dx \frac{g(x + i\eta)}{x - x_0 + i\eta} = \mathcal{P} \int_a^b dx f(x) - i\pi g(x_0) \quad (15)$$

Wie wir deutlich sehen, ist in diesem Fall die Bedingung, daß $f \in H_+^2$ liegt, denn wir haben $f(x)$ durch $\lim_{\eta \rightarrow 0} f(x + i\eta)$ ersetzt. Genauso läßt sich der umgekehrte Fall zeigen, daß das Heranpirschen des Integrationsweges von unten an den Pol einem Heranpirschen des Pols von unten an den Integrationsweg entspricht. In diesem Fall ist die Bedingung, daß $f \in H_-^2$ ist. Es beruhigt uns, daß wir in der Tat durch die Entscheidung der Hardyklasse für den Integranden auch das Ergebnis der Integralfunktion eindeutig entschieden haben. Fassen wir kurz zusammen:

$$\int_{\Gamma^\pm} dz f(z) = \lim_{\eta \rightarrow 0} \int_a^b dx f(x \pm i\eta) \quad (16)$$

$$\text{formal} \quad F^\pm(a, b) := \int_a^b dx f^\pm(x) \quad (17)$$

$$\text{mit} \quad f^\pm(x) := \lim_{\eta \rightarrow 0} f(x \pm i\eta) \quad (18)$$

$$\text{und} \quad f^\pm \in H_\pm^2 \quad (19)$$

Im Falle $f(x) = \frac{g(x)}{x-x_0}$ überträgt sich die Zugehörigkeit zu einer Hardyklasse auf die Zählerfunktion g .

1.1 Physikalischer Bezug

Was soll dieses ganze Gehampel? Nun, Integrale über Polstellen tauchen in der Physik immer dann auf, wenn wir es mit Resonanzen zu tun haben. Und wir haben es ziemlich oft mit Resonanzen zu tun. Wir werden im nächsten Kapitel auf eine quantenmechanische Resonanz geführt, die entscheidende Konsequenzen hat. Stellen wir uns vor, der Hamiltonian eines Systems besitze derartige Resonanzen. Da er über die Zeit integriert und mit i multipliziert gerade den Exponenten der zeitabhängigen Wellenfunktion darstellt, kann es passieren, daß imaginäre Werte im Exponenten auftauchen. Dies führt dann zu einem exponentiellen Abfall der entsprechenden Komponente der Anfangs-Wellenfunktion.

2 Gestörter Hamiltonian

Der Hamiltonian eines Systems zerfalle in einen zeitunabhängigen und einen zeitabhängigen Anteil:

$$H(t) = H_0 + W(t) \quad . \quad (20)$$

Wir nehmen an, daß die *Störung* $W(t)$ sehr klein ist. Etwas präziser: wir wählen einen sehr kleinen *Störfaktor* $\lambda \ll 1$ und einen λ -unabhängigen Operator $\bar{W}(t)$, so daß

$$W(t) = \lambda \bar{W}(t) \quad . \quad (21)$$

Wie immer wird die zeitliche Entwicklung des Systems bestimmt vom *Entwicklungsoperator*:

$$|\psi(t)\rangle = U(t)|\psi_0\rangle \quad (22)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} U(t) = H(t)U(t) \quad . \quad (23)$$

Nun entwickeln wir jedoch den Entwicklungsoperator:

$$U(t) = \sum_{n=0}^{\infty} U^{(n)}(t) \quad (24)$$

Der n 'te Summand sei nun proportional zur n 'ten Potenz der Störung: anderen Worten:

$$U^{(n)}(t) \sim \lambda^n \quad (25)$$

Wenn das erfüllt ist, konvergiert die unendliche Reihe rasch und wir können sie nach dem N 'ten Glied abbrechen; damit haben wir *Störtheorie N 'ter Ordnung*.

Der Entwicklungoperator wird approximiert durch eine Summe der Ordnung N und die allgemein unlösbare Gleichung (23) kann annähernd gelöst werden durch

$$U(t) \approx \sum_{n=0}^N U^{(n)}(t) \quad . \quad (26)$$

Nun wollen wir uns die $U^{(n)}$'s beschaffen! Gleichung (23) kann rekursiv integriert werden:

$$U(t) = \mathbb{1} + \frac{1}{i\hbar} \int_{t_0}^t dt' H(t') U(t') \quad (27)$$

$$\Rightarrow U(t) = \mathbb{1} + \frac{1}{i\hbar} \int_{t_0}^t dt' H(t') + \frac{1}{(i\hbar)^2} \int_{t_0}^t dt' \int_{t_0}^{t'} dt'' H(t') H(t'') U(t'') \quad (28)$$

$$\vdots \quad (29)$$

$$\Rightarrow U(t) = \mathbb{1} + \sum_{n=1}^{\infty} U^{(n)}(t) \quad (30)$$

$$\text{mit } U^{(n)}(t) := \frac{1}{(i\hbar)^n} \int_{t_0}^t dt' H(t') \dots \int_{t_0}^{t^{(n-1)}} dt^{(n)} H(t^{(n)}) \quad (31)$$

$$\text{und } t \geq t' \geq \dots \geq t_0 \quad (32)$$

Aber diese $U^{(n)}$'s sind noch nicht polynomial in λ . Um das hinzukriegen, transformieren wir ins *Wechselwirkungsbild*. Der Transformationsoperator

$$U_0 := e^{-\frac{i}{\hbar} H_0 t} \quad (33)$$

transformiert Zustände und Operatoren gemäß

$$|\tilde{\psi}(t)\rangle = U_0^\dagger |\psi(t)\rangle \quad (34)$$

$$\tilde{A} = U_0^\dagger A U_0 \quad (35)$$

Wir haben $t_0 = 0$ gesetzt, so daß automatisch $|\tilde{\psi}_0\rangle = |\psi_0\rangle$ erfüllt ist. Jetzt wird die Dynamik geregelt vom *Wechselwirkungs-Entwicklungoperator*:

$$|\tilde{\psi}(t)\rangle = \tilde{U}(t) |\psi_0\rangle \quad (36)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \tilde{U}(t) = \tilde{W}(t) \tilde{U}(t) \quad . \quad (37)$$

$$\text{wobei } \tilde{W}(t) = U_0^\dagger W(t) U_0 = e^{\frac{i}{\hbar} H_0 t} W(t) e^{-\frac{i}{\hbar} H_0 t} \quad (38)$$

Die Approximationssumme lautet damit:

$$\tilde{U}(t) = \mathbb{1} + \sum_{n=1}^{\infty} \tilde{U}^{(n)}(t) \quad (39)$$

$$\tilde{U}^{(n)}(t) := \frac{1}{(i\hbar)^n} \int_0^t dt' \tilde{W}(t') \dots \int_0^{t^{(n-1)}} dt^{(n)} \tilde{W}(t^{(n)}) \quad (40)$$

$$\text{und} \quad t \geq t' \geq \dots \geq 0 \quad (41)$$

Damit ist wegen $\tilde{W}(t) \sim \lambda$ die polynomiale Abhängigkeit in λ erreicht und indem wir den approximierten Entwicklungsoperator benutzen, betreiben wir Störtheorie N 'ter Ordnung. Die *Rücktransformation* ins Schrödingerbild wird durchgeführt durch:

$$|\psi(t)\rangle = U_0 |\tilde{\psi}(t)\rangle = U_0 \tilde{U}(t) |\psi_0\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar} H_0 t} \tilde{U}(t) |\psi_0\rangle \quad (42)$$

Im Grunde ist damit alles gesagt. Für konkrete Aussagen braucht man die Matrixdarstellung des Entwicklungsoperators. Das Betragsquadrat eines Matrixelements liefert die *Übergangswahrscheinlichkeit* von einem Zustand zum andern. Wenn sich das System zur Zeit $t = 0$ im Anfangszustand $|\psi_i\rangle$ befunden hat, dann verifiziert eine Messung zur Zeit t den Zustand $|\psi_f\rangle$ mit der Wahrscheinlichkeit

$$P_{i \rightarrow f}(t) = |\langle \psi_f | \psi(t) \rangle|^2 = |\langle \psi_f | U(t) | \psi_i \rangle|^2 \quad (43)$$

Für die Störreihe des Entwicklungsoperators demnach:

$$P_{i \rightarrow f}(t) = \left| \sum_{n=0}^{\infty} \langle \psi_f | \psi(t) \rangle^{(n)} \right|^2 \quad (44)$$

$$\text{mit} \quad \langle \psi_f | \psi(t) \rangle^{(n)} := U_{fi}^{(n)}(t) = \langle \psi_f | U^{(n)}(t) | \psi_i \rangle \quad (45)$$

$$(46)$$

Wenn man das ungestörte System gelöst hat, nimmt man z.B. die bekannten Eigenzustände von H_0 und untersucht Übergänge von einem H_0 -Eigenzustand zum andern.

3 Störtheorie erster Ordnung

In erster Ordnung Störtheorie approximieren wir den Entwicklungsoperator durch

$$\tilde{U}(t) \approx \mathbb{1} + \frac{1}{i\hbar} \int_0^t dt' e^{\frac{i}{\hbar} H_0 t'} W(t') e^{-\frac{i}{\hbar} H_0 t'} \quad (47)$$

3.1 Abrupt eingeschaltete Störung

Schaltet man eine konstante Störung W zu einem Zeitpunkt $t_1 \geq 0$ abrupt ein, d.h.

$$W(t) \rightarrow \Theta(t - t_1)W(t) \quad (48)$$

dann ist einfach die untere Integralgrenze in (47) entsprechend zu verschieben, d.h.:

$$\tilde{U}(t) \approx \mathbb{1} + \Theta(t - t_1) \frac{1}{i\hbar} \int_{t_1}^t dt' e^{\frac{i}{\hbar}H_0 t'} W(t') e^{-\frac{i}{\hbar}H_0 t} \quad (49)$$

Bis zum Zeitpunkt t_1 gibt es keine Störung, also wirkt \tilde{U} als Einheitsoperator und das System entwickelt sich nur durch U_0 .

3.2 Langsam eingeschaltete Störung

Schaltet man die Störung W mit einer Exponentialfunktion ein, also

$$W(t) \rightarrow e^{\eta t} W(t) \quad (50)$$

und nimmt zunächst η groß an, dann kann man die untere Grenze des Intervalls ins negativ Unendliche schieben, weil der Beitrag über der negativen Halbachse wegen der gegen $-\infty$ rapide abfallenden Störung nicht besonders groß ist. Anschließend nimmt man den Grenzwert $\eta \rightarrow 0$, womit man eine unendlich langsam eingeschaltete Störung simuliert:

$$\tilde{U}(t) \approx \mathbb{1} + \lim_{\eta \rightarrow 0} \frac{1}{i\hbar} \int_{-\infty}^t dt' e^{\frac{i}{\hbar}H_0 t'} e^{\eta t'} W(t') e^{-\frac{i}{\hbar}H_0 t} \quad (51)$$

Das klingt nicht gut, dieses hin und her. Der Effekt ist folgender: durch das Verschieben der unteren Intergationsgrenze genügt es, die Stammfunktion des Integranden zu finden und bei t auszuwerten, denn der Beitrag bei $-\infty$ verschwindet. Anschließend läßt man $\eta \rightarrow 0$ gehen und verleugnet die ganze Operation, d.h. man tut so, als wäre die Störung die ganze Zeit konstant gewesen. De facto betrachtet man also eine unendlich lang andauernde Störung, von $-\infty$ bis t . Der Effekt ist essentiell derselbe, als betrachte man eine unendlich lange Störung von 0 bis ∞ , solange W symmetrisch in der Zeit ist, d.h. $W(-t) = W(t)$, wobei allerdings diese Form den Vorteil hat, explizit von t abzuhängen, während man den durch $t \rightarrow \infty$ gewonnenen Ausdruck wieder durch die Aussage “ t genügend groß” explizit t -abhängig kriegen muß. Außerdem muß man dann noch das Wort “genügend” präzisieren, vor allem im Hinblick auf die Ungültigkeit der Störtheorie für große Zeiten.

3.3 Diskrete Übergänge

Nehmen wir an, das Spektrum von H_0 sei diskret. Dann existiert eine Spektraldarstellung

$$H_0 = \sum_k E_k |\varphi_k\rangle \langle \varphi_k| \quad (52)$$

Das System habe den Anfangszustand $|\varphi_i\rangle$. Dann befindet es sich zur Zeit t annähernd im Zustand

$$|\psi(t)\rangle \approx |\varphi_i\rangle + \frac{1}{i\hbar} \int_0^t dt' e^{\frac{i}{\hbar}(H_0 - E_i)t'} W(t') |\varphi_i\rangle \quad (53)$$

Also lautet die Übergangswahrscheinlichkeit in den Zustand $|\varphi_f\rangle$:

$$P_{i \rightarrow f}(t) = |\langle \varphi_f | \psi(t) \rangle|^2 \quad (54)$$

$$= \left| \delta_{fi} + \frac{1}{i\hbar} \int_0^t dt' e^{\frac{i}{\hbar}(E_f - E_i)t'} \langle \varphi_f | W(t') | \varphi_i \rangle \right|^2 \quad (55)$$

Schauen wir uns zunächst die Wahrscheinlichkeit an, daß das System im Anfangszustand *bleibt*:

$$P_i(t) = \left| 1 + \frac{1}{i\hbar} \int_0^t dt' \langle \varphi_i | W(t') | \varphi_i \rangle \right|^2 \quad (56)$$

Da da diagonale Matrixelement reell ist, ist das Integral selbst rein imaginär und wir müssen erkennen:

$$P_i(t) \geq 1 \quad (57)$$

Das macht keinen Sinn. Fazit: Erste Ordnung Störtheorie ist mit Vorsicht zu genießen. Wahrscheinlichkeiten erfüllen manchmal nicht einmal die fundamentalsten Bedingungen, Wahrscheinlichkeiten zu sein. Erst Terme höherer Ordnung korrigieren diese Unsinnigkeiten.

Beschränken wir uns also auf den Fall $i \neq g$ echter Übergänge. Dann sieht die Übergangswahrscheinlichkeit so aus:

$$P_{i \rightarrow f}(t) = \left| \frac{1}{i\hbar} \int_0^t dt' e^{\frac{i}{\hbar}(E_f - E_i)t'} \langle \varphi_f | W(t') | \varphi_i \rangle \right|^2 \quad (58)$$

3.3.1 Harmonisch oszillierende Störung

Nehmen wir an, unser ungestörtes System ist an ein schwingendes Feld gekoppelt.

$$W(t) = W \cos(\omega t) \quad (59)$$

Wir erhalten die Übergangswahrscheinlichkeit:

$$P_{i \rightarrow f}(t) = \frac{1}{4\hbar^2} |\langle \varphi_f | W | \varphi_i \rangle|^2 \left| \frac{e^{i(\omega_{fi} + \omega)t} - 1}{\omega_{fi} + \omega} + \frac{e^{i(\omega_{fi} - \omega)t} - 1}{\omega_{fi} - \omega} \right|^2 \quad (60)$$

wobei
$$\omega_{fi} := \frac{E_f - E_i}{\hbar} \quad (61)$$

Sie ist auf Abb. 4 dargestellt. Für wachsendes t wird die Funktion immer schärfer um die beiden Resonanzpole $\pm\omega$ gepeakt.

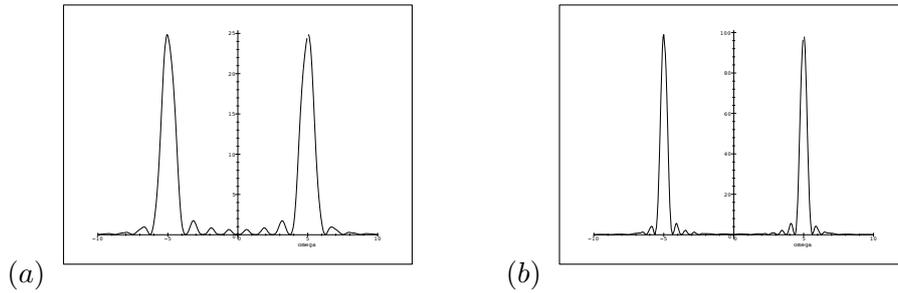


Abbildung 4: Resonanzpole.

Das bedeutet:

- Ist ω fest vorgegeben, dann wird es mit der Zeit wird es immer wahrscheinlicher, daß ein Übergang auf den Zustand mit der um $\pm\hbar\omega$ verschobenen Energie stattfindet. Dies entspricht der Absorption bzw. Emission eines Energiequants $\hbar\omega$ durch das System. Da das Spektrum diskret ist, liegt der Endzustand im allgemeinen *in der Nähe* des um $\hbar\omega$ verschobenen Niveaus.
- Ist ω_{fi} fest vorgegeben, d.h. sucht man nach der Übergangswahrscheinlichkeit auf ein bestimmtes Niveau $|\varphi_f\rangle$, so gibt es eine Resonanz bei $\omega = \pm\omega_{fi}$. Hier ist die Wahrscheinlichkeit eines Übergangs am höchsten.

3.3.2 Konstante Störung

Wählt man $\omega = 0$, so erhält man den Fall einer konstanten Störung. Die Übergangswahrscheinlichkeit ergibt dann

$$P_{i \rightarrow f}(t) = \frac{1}{\hbar^2} |\langle \varphi_f | W | \varphi_i \rangle|^2 \left| \frac{e^{i\omega_{fi}t} - 1}{\omega_{fi}} \right|^2 \quad (62)$$

$$= \frac{1}{\hbar^2} |\langle \varphi_f | W | \varphi_i \rangle|^2 \frac{4\sin^2(\frac{\omega_{fi}t}{2})}{\omega_{fi}^2} \quad (63)$$

Falls die Störung bei t_1 abrupt eingeschaltet wird, ändert sich nicht besonders viel:

$$P_{i \rightarrow f}(t) = \frac{1}{\hbar^2} |\langle \varphi_f | W | \varphi_i \rangle|^2 \left| \frac{e^{i\omega_{fi}t} - e^{i\omega_{fi}t_1}}{\omega_{fi}} \right|^2 \Theta(t - t_1) \quad (64)$$

$$= \frac{1}{\hbar^2} |\langle \varphi_f | W | \varphi_i \rangle|^2 \left| \frac{e^{i\omega_{fi}(t-t_1)} - 1}{\omega_{fi}} \right|^2 \Theta(t - t_1) \quad (65)$$

Die Wahrscheinlichkeit ist um t_1 verschoben. Doch nehmen wir im folgenden $t_1 = 0$ an und betrachten das Verhalten der Wahrscheinlichkeit im Laufe der Zeit.

3.3.3 Eine Energie-Zeit-Unschärfe

Die beiden Peaks schmelzen für $\omega = 0$ zu einem einzigen Peak zusammen, wie auf Abb. 5 zu sehen.

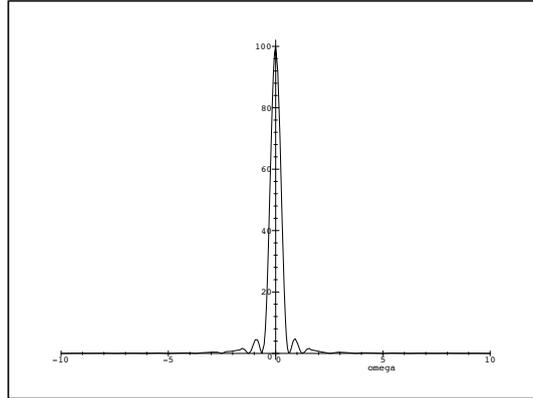


Abbildung 5: Verschmelzung der Resonanzpole.

Offenbar werden nun Übergänge bevorzugt, bei denen die Energie erhalten bleibt. Das kann auch gar nicht anders sein, denn schließlich ist der Gesamt-Hamiltonian zeitunabhängig. Nun kann man staunen und fragen: Wie kommt es denn zu Übergängen, bei denen die Energie *nicht* erhalten bleibt? Betrachten wir die Breite des Peaks:

$$\Delta\omega = \frac{4\pi}{t} \quad (66)$$

Es gibt also eine Relation

$$\Delta\omega t \approx 4\pi\hbar \quad , \quad (67)$$

und die sieht so ähnlich aus wie eine *Energie-Zeit-Unschärfe*. Dazu folgende Überlegung: Wenn ich zur Zeit $t = 0$ eine exakte Messung mache und

mich dann um t Sekunden später durch eine wiederholte Messung von ihrer Richtigkeit überzeugen will, so liege ich umso weniger häufig daneben, desto länger ich mit der zweiten Messung warte. Dies wirft ein schauriges Licht auf die Objektivität von Quantenzuständen. Das Prinzip der Wiederholbarkeit besagt, daß ein Experiment nichts wert ist, solange es nicht wiederholt werden kann, daß ein Meßergebnis nichts taugt, wenn ich es nicht überprüfen kann. Offenbar läßt sich die Natur die Freiheit, innerhalb extrem kurzer Zeiten (in der Größenordnung von \hbar) ihren eigenen Energiesatz zu verletzen. Oder genauer: Wenn ich tatsächlich innerhalb so kurzer Zeit eine zweite Messung der Energie mache, dann darf ich mich nicht wundern, daß ich ein anderes Ergebnis erhalte. Wer sagt denn, daß ich mich nicht beim ersten Mal getäuscht habe? Niemand, denn: wenn ich anschließend eine dritte und vierte mache, so werden sie mir allesamt das zweite Ergebnis bestätigen, insofern es in angemessenem zeitlichen Abstand passiert. Innerhalb extrem kurzer Zeiten gibt es keine objektive Realität.

3.3.4 Linienbreiten und die Dauer von Sprüngen

Im Fall $\omega \neq 0$ kann das System ein Energiequant von $\hbar\omega$ gewinnen oder verlieren und dadurch auf ein entsprechendes Niveau springen. Findet dieser Sprung jedoch innerhalb allzu kurzer Zeit statt, so gibt es eine gewisse Wahrscheinlichkeit, daß er danebengeht. Das System landet nicht genau auf dem Energieniveau, welches der Energiedifferenz entspricht, sondern auf einem mehr oder weniger dicht benachbarten. Betrachten wir das Gesamtsystem, so ist auch hier die Energie nicht erhalten geblieben. Im Falle der Emission eines Energiequants springt das System auf ein gewisses niedriger gelegenes Niveau, emittiert aber Licht mit einer gewissen Streuung um den eigentlichen Wert, der sich aus der Differenzenergie der beiden Niveaus ergibt. Folge: Wir sehen (bei einer hohen Zahl Sprünge der gleichen Art) eine Spektrallinie, die nicht absolut scharf ist, sondern eine gewisse *Linienbreite* besitzt. Die Beobachtung von endlichen Linienbreiten ist folglich ein unmittelbares Indiz dafür, daß Energie innerhalb sehr kurzer Zeiten im allgemeinen nicht erhalten bleibt.

Was bedeutet aber die “Dauer eines Sprungs”? Wir hatten festgestellt, daß zwei unmittelbar aufeinanderfolgende Energie-Messungen Ergebnisse liefern können, die sich widersprechen (Fall $\omega = 0$). Es macht keinen Sinn, einer von beiden a priori Realität zuzusprechen, sonst führen die Gesetze der Physik offenkundig in Inkonsistenzen. Bleiben wir bei der Definition, daß die Realität eines experimentellen Befunds von seiner Wiederholbarkeit abhängt. Falls wir die Energiemessung nicht allzuoft hintereinander wiederholen, so wird sich ein bestimmter Wert etablieren, den wir als den “realen” Meßwert bezeichnen dürfen. Wenn wir aber zwei verschiedene Meßergebnisse erhalten, so bedeutet das, daß zwischen den beiden Messungen offensichtlich ein Sprung stattgefunden hat, ohne daß jedoch Energie aufgenommen

oder abgegeben wurde. Die mittlere Energiedistanz zwischen den Meßergebnissen ist reziprok zur Zeit, die zwischen den Messungen verstrichen ist, also exakt der Zeit, die das System für den Sprung maximal benötigt haben kann. Wir ordnen dieser Zeit den Begriff “Sprungdauer” zu, denn er ist unmittelbar gekoppelt an die “Sprungweite” und hat über die Beobachtung etwa von Linienbreiten (Verwandte der Sprungweiten) eine klare physikalische Bedeutung. Anders ausgedrückt: Wenn wir eine Linienbreite $\Delta\omega$ einer Spektrallinie ω beobachten, so beobachten wir ein Ensemble aus Sprüngen von einem Energieniveau E_i in ein Energieniveau E_f mit $\omega = (E_f - E_i)/\hbar$, deren mittlere “Dauer” wir über $\Delta t \approx \hbar/\Delta\omega$ bestimmen.

Die Linienbreite wie auch die Dauer von Sprüngen zwischen Energieniveaus sind mittlere statistische Größen, denen keine *objektive* Qualität zukommt, sondern die ein Maß für die *Kenntnis* über diese Prozesse darstellen. Man kann sagen: Wenn ich dem Sprung $i \rightarrow f$ eine Dauer Δt zuordne, so ist dies zwar ein indirekter Schluß (von der Linienbreite her), aber ich kann für diesen Sprung in einem (wiederholbaren) Experiment eine größere Sprungdauer falsifizieren (denn der Sprung läßt sich gemäß der Unschärferelation bis zu der angegebenen Größe auflösen und also im Prinzip beobachten) und keine (wesentlich) kleinere verifizieren (weil dann die statistische Abweichung der Energie so groß wird, daß das Experiment nicht wiederholbar ist).

Bei unseren Betrachtungen ist zur Zeit $t = 0$ der Zustand $|\varphi_i\rangle$ verifiziert worden, etwa durch eine direkte Messung von H_0 . Zur selben Zeit (oder auch früher) wird eine oszillierende Störung eingeschaltet. Nach einer gewissen verstrichenen Zeit t empfangen wir ein emittiertes Photon

3.3.5 Entartete Energieniveaus

Wir betrachten nun Zeitskalen, auf denen die Peaks (für gegebenes ω) unendlich schmal sind, nehmen jedoch als ihren Maximalwert 1 an, weil es sich um diskrete Wahrscheinlichkeiten handelt (da ja der Übergang in diskrete Zustände erfolgt). Wir idealisieren die Wahrscheinlichkeitsverteilung der Übergänge auf

$$P_{i \rightarrow f} = \frac{1}{Z} |\langle \varphi_f | W | \varphi_i \rangle|^2 \{ \delta(\omega_{if} - \omega) + \delta(\omega_{if} + \omega) \} \quad (68)$$

wobei es sich um *Kronecker- δ* 's handelt, d.h.

$$\delta(n) := \begin{cases} 1 & ; n = 0 \\ 0 & ; n \neq 0 \end{cases} \quad (69)$$

und Z eine angemessene Normierungskonstante ist, definiert durch

$$Z := \sum_f |\langle \varphi_f | W | \varphi_i \rangle|^2 \{ \delta(\omega_{if} - \omega) + \delta(\omega_{if} + \omega) \} \quad (70)$$

Dann ist nämlich gewährleistet, daß die Summe der Wahrscheinlichkeiten der Übergänge auf alle möglichen Energieniveaus 1 ergibt:

$$\sum_f P_{i \rightarrow f} = 1 \quad (71)$$

4 Die C-Transformation

4.1 Definition

Die explizite Form der Bestimmungsgleichung legt eine Anwendung der Laplace-Transformation nahe. Doch wir wollen die Laplace-Transformation leicht modifizieren, weil wir dann bestimmte Zusammenhänge deutlicher werden.

die Laplace-Transformation L einer Funktion $f : \mathbb{R}_+ \rightarrow \mathbb{C}$ ist gegeben durch

$$\hat{f}(s) = L\{f(t)\} = \int_0^{\infty} dt e^{-st} f(t) \quad , \quad (72)$$

wann immer der Ausdruck existiert. Als Funktion eines komplexen Arguments s verstanden, gibt es immer ein $a \in \mathbb{R}$, so daß $\hat{f}(s)$ mit Sicherheit holomorph auf der komplexen Halbebene $\text{Re}(s) > a$ ist. Der Wert a hängt von der zu transformierenden Funktion $f(t)$ ab. Wenn man versucht, die Funktion $\hat{f}(s)$ auf die restlichen Gebiete der komplexen Ebene fortzusetzen, so wird man auf Singularitäten und Schnitte stoßen, bei denen eine analytische Fortsetzung entweder gar nicht oder nicht eindeutig möglich ist. Dort läßt man die Funktion undefiniert und versteht unter dem Symbol $\hat{f}(s)$ nun die auf obige Weise fortgesetzte Funktion. Sei S eine Kurve in der komplexen Ebene, die bei $-i\infty$ beginnt und bei $+i\infty$ endet, und die durch das Holomorphiegebiet von $\hat{f}(s)$ laufe, dann ist die Umkehrtransformation gegeben durch

$$f(t) = L^{-1}\{\hat{f}(s)\} = \frac{1}{2\pi} \int_S ds e^{st} \hat{f}(s) \quad (73)$$

Wir werden nun die Laplace-Transformation modifizieren, indem wir sie im Uhrzeigersinn “kippen”. Formal geschieht dies einfach durch die Definition einer “C-Transformierten” $\check{f}(z)$ mittels

$$\check{f}(z) := -i\hat{f}(-iz) \quad (74)$$

War $\hat{f}(s)$ eine in der Halbebene $\text{Re}(s) < a$ gewiß holomorphe Funktion, so ist es $\check{f}(z)$ für $\text{Im}(z) > a$. Wieder wird eine analytische Fortsetzung auch für $\text{Im}(z) < a$ gemacht, so weit die Fortsetzung möglich und eindeutig ist. Für die Rücktransformation kippen wir den Integrationsweg S um 90° im

entgegengesetzten Uhrzeigersinn (wenn wir im Ursprung den Drehpunkt ansetzen) und erhalten die Kurve Z , die nun der über $\text{Im}(z) = a$ gelegenen Halbebene verläuft und aus dem negativ ins positiv Unendliche führt. Nehmen wir an, die transformierte Funktion $\check{f}(z)$ habe folgende Eigenschaften:

- 1) Es gibt ein nach unten beschränktes Intervall $I = [x_0, \infty)$, so daß $\check{f}(z)$ auf der geschlitzten Ebene $\mathbb{C} \setminus I$, holomorph ist.
- 2) $\check{f}(z) \rightarrow 0$ für $\text{Im}z \rightarrow -\infty$.

Wenn dies erfüllt ist, können wir den Anfangspunkt des Integrationsweges Z nach $+\infty$ verschieben, und zwar so, daß er etwaige Singularitäten und Schnitte des Integranden auf der reellen Achse im Uhrzeigersinn umläuft. Die Integration über den (unendlichen) Halbkreis in der unteren Halbebene liefert wegen des exponentiellen Integralkerns e^{-izt} keinen Beitrag¹. Die so verformte Kurve (siehe Abb. 6) wollen wir C nennen und die so erhaltene Transformation wollen wir als

C-Transformation

$$\check{f}(z) = C\{f(t)\} = -i \int_0^{\infty} dt e^{izt} f(t) \quad (75)$$

$$f(t) = C^{-1}\{\check{f}(z)\} = \frac{i}{2\pi} \int_C dz e^{-izt} \check{f}(z) \quad (76)$$

bezeichnen. Die C-Transformation² liegt zwischen einer Fourier- und einer Laplace-Transformation, denn sie hat einerseits einen oszillierenden Integralkern und andererseits verläuft die Integration über eine Halbachse. Sie wird auf diese Weise Anfangswertproblemen besonders gerecht und speziell dem Schrödinger-AWP aufgrund der oszillierenden Lösungen.

Hier einige wichtige Transformationsregeln:

Phasenverschiebung

$$e^{at} f(t) \xrightarrow{C} \check{f}(z - ia) \quad (77)$$

¹Dies gilt natürlich nur für $t \geq 0$. Man kann aber versuchen, die erhaltene Funktion, so fortzusetzen, daß sie auch für $t < 0$ definiert ist. Dies ist ganz analog zur Fortsetzung der transformierten Funktion auf die andere komplexe Halbebene. Wenn die Funktion ursprünglich über $(-\infty, \infty)$ definiert war und nicht analytisch auf $(-\infty, \infty)$ ist, dann enthält sie mehr Information, als durch ihre Ableitungen auf $t \in [0, \infty)$ gegeben ist. Diese Information geht natürlich bei der Integration von $t = 0$ bis ∞ verloren und ist daher nach Rücktransformation nicht mehr zu rekonstruieren.

²In meiner Diplomarbeit nenne ich diese Transformation die "LF-Transformation".

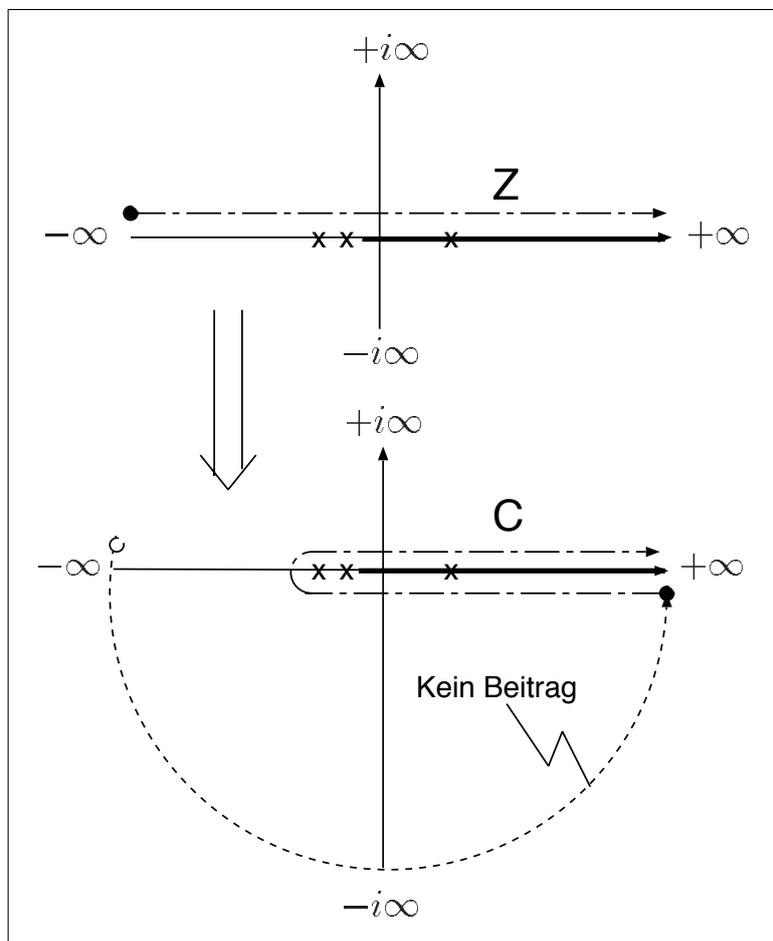


Abbildung 6: Verformung des ursprünglichen Integrationsweges Z oberhalb der reellen Achse in die Kurve C um die Singularitäten und Schnitte des Integranden herum.

Faltung

$$(g * f)(t) \xrightarrow{C} i\check{g}(z)\check{f}(z) \quad (78)$$

Ableitung

$$f'(t) \xrightarrow{C} if(+0) - iz\check{f}(z) \quad (79)$$

Vielfaches im Argument

$$f(at) \xrightarrow{C} \frac{1}{a}\check{f}\left(\frac{z}{a}\right) \quad (80)$$

Delta-Funktion

$$\delta(t - a) \xrightarrow{C} e^{iza} \quad (81)$$

Exponentialfunktion

$$e^{-iat} \xrightarrow{C} \frac{1}{z - a} \quad (82)$$

$$(83)$$

5 Die Resolvente

Die Resolvente ist, wie wir gleich sehen werden, ein äußerst nützliches Ding für die Streu- und Störungstheorie. Die Resolvente eines Operators A ist definiert durch die operatorwertige Funktion

$$R_A(z) := \frac{1}{z - A} \quad (84)$$

Wir werden uns im weiteren Verlaufe nur um die Resolventen von Hamiltonoperatoren H kümmern, daher vereinbaren wir

$$R(z) = \frac{1}{z - H} \quad (85)$$

Wenn der Gesamthamiltonoperator H zeitunabhängig ist (und wir gehen im folgenden stets davon aus), löst bekanntlich der Zeitentwicklungsoperator

$$U(t) = e^{-iHt} \quad (86)$$

das Schrödinger-AWP durch

$$|\psi(t)\rangle = U(t)|\psi_0\rangle \quad , \quad (87)$$

wenn zum Zeitpunkt $t = 0$ der Initialzustand $|\psi_0\rangle$ vorliegt. Unterziehen wir den Operator $U(t)$ einer C-Transformation, erhalten wir die Resolvente von H :

$$\check{U}(z) = -i \int_0^\infty dt e^{i(z-H)t} = \frac{1}{z - H} = R(z) \quad (88)$$

Das Integral existiert nur für $\text{Im}(z) > 0$, jedoch verstehen wir unter $R(z)$ die analytische Fortsetzung auf die Gebiete der komplexen Ebene, wo $R(z)$ beschränkt ist. Dieser Vorgang fördert das *Spektrum* von H zutage, und zwar in folgender Weise:

Definition 1 (Spektrum) Alle Punkte $z \in \mathbb{C}$, für die die Resolvente $R_A(z)$ eines linearen Operators A existiert und beschränkt ist, heißen **reguläre Punkte** von A . Sie bilden die **Resolventenmenge** $\varrho(A)$ von A . Alle anderen Punkte heißen **Spektralwerte** und bilden das **Spektrum** $\sigma(A)$ von A , d.h.

$$\varrho \dot{\cup} \sigma = \mathbb{C} \quad . \quad (89)$$

Dabei bezeichnet $\dot{\cup}$ die disjunkte Vereinigung.

Äquivalent dazu ist auch die folgende Definition:

Das Spektrum σ ist die Menge derjenigen Punkte, für die der Operator $(z - A)$ **nicht bijektiv** ist.

Man unterscheidet zusätzlich:

Das **diskrete Spektrum** σ_d ist die Menge derjenigen Punkte, für die der Operator $(z - A)$ **nicht injektiv** ist.

Die diskreten Spektralwerte sind es, die man als "Eigenwerte" bezeichnet. Alle übrigen Spektralwerte bilden das **kontinuierliche Spektrum** σ_c , so daß gilt:

$$\sigma_c \dot{\cup} \sigma_d = \sigma \quad . \quad (90)$$

In der Physik heißen Spektralwerte generell Eigenwerte und man unterscheidet zwischen *diskreten* und *kontinuierlichen* Eigenwerten. Zu diskreten Eigenwerten a existieren Vektoren $|a\rangle$, so daß gilt

$$(a - A)|a\rangle = |o\rangle \quad (91)$$

$$\Leftrightarrow A|a\rangle = a|a\rangle \quad . \quad (92)$$

Diese Vektoren sind die **Eigenvektoren** von A . Man findet jedoch Vektoren außerhalb des Hilbertraums, die die Eigenwertgleichung zu kontinuierlichen Eigenwerten erfüllen und die man in der Physik folglich ebenfalls Eigenvektoren nennt. Es kann diskrete Eigenwerte geben, die ins kontinuierliche Spektrum eingebettet sind. Beim Friedrichsmodell liegt genau dieser Fall vor.

Das diskrete Spektrum besteht aus den *Singularitäten* der Resolvente (dort ist sie nicht definierbar), während sich das kontinuierliche Spektrum aus *Schnitten* (dort ist sie definierbar, aber nicht beschränkt) in der komplexen Ebene.

Wir werden nun zeigen, daß das Spektrum physikalischer Observablen auf der reellen Achse liegt. Dazu einige Definitionen:

Definition 2 (Adjungierter Operator) Der zu einem Operator A **adjungierte** Operator A^\dagger ist definiert durch

$$\langle A^\dagger \varphi | \psi \rangle = \langle \varphi | A \psi \rangle \quad \text{für alle } |\psi\rangle \in D_A, |\varphi\rangle \in D_{A^\dagger} \quad , \quad (93)$$

dabei bezeichnet D_A, D_{A^\dagger} den Definitionsbereich von A bzw. A^\dagger .

Definition 3 (Symmetrischer Operator) Der Operator A heißt *symmetrisch*, falls

$$1) \quad A = A^\dagger \quad \text{auf } D_A \quad (94)$$

$$2) \quad D_A \subseteq D_{A^\dagger} \quad (95)$$

Man schreibt zusammenfassend $A \subseteq A^\dagger$.

Definition 4 (Selbstadjungierter Operator) Ein symmetrischer Operator A heißt *selbstadjungiert*, falls $D_A = D_{A^\dagger}$ oder zusammenfassend $A = A^\dagger$.

Definition 5 (Hermitescher Operator) Ein selbstadjungierter Operator heißt *hermitesch*, falls er beschränkt ist, d.h. seine Norm existiert:

$$\|A\| \equiv \sup \frac{\|A|\psi\rangle\|}{\|\psi\|} < \infty \quad (96)$$

Da viele wichtige Operatoren der Quantenmechanik unbeschränkt sind (z.B. Orts- und Impulsoperator) identifizieren wir mit physikalischen Observablen selbstadjungierte Operatoren. Man kann zeigen, daß folgendes Kriterium gilt:

Satz 1 (Kriterium für reguläre Punkte) Für einen selbstadjungierten Operator A ist z genau dann ein regulärer Punkt, d.h. $z \in \rho(A)$, wenn

$$\exists(\delta > 0) : \quad \|(z - A)|\psi\rangle\| \geq \delta\|\psi\| \quad \text{für alle } |\psi\rangle \in D_A \quad (97)$$

Dies bedeutet gerade, daß die Resolvente von A bei z existiert und beschränkt ist.

Nun beweisen wir den folgenden wichtigen

Satz 2 (Spektrum selbstadjungierter Operatoren) Das Spektrum selbstadjungierter Operatoren liegt auf der reellen Achse.

Beweis: Sei $z = x + iy$ mit $y \neq 0$, dann folgt

$$\|(z - A)|\psi\rangle\|^2 = \|(x + iy - A)|\psi\rangle\|^2 \quad (98)$$

$$= \|(x - A)|\psi\rangle\|^2 + y^2\|\psi\|^2 + iy\langle\psi|(x - A)\psi\rangle - iy\langle(x - A)\psi|\psi\rangle \quad (99)$$

$$= \|(x - A)|\psi\rangle\|^2 + y^2\|\psi\|^2 \quad (100)$$

$$\Rightarrow \|(z - A)|\psi\rangle\|^2 \geq y^2\|\psi\|^2 \quad (101)$$

Damit ist nach Satz 1 wegen $y \neq 0$ z ein regulärer Punkt, gehört also nicht zum Spektrum. Also muß für Spektralwerte $y = 0$ sein, d.h. sie liegen auf der reellen Achse. □

Die Resolvente ist auf der Resolventenmenge holomorph, außerdem verschwindet sie für $|z| \rightarrow \infty$. Damit erfüllt sie die Bedingungen für eine C-Transformation entlang der Kurve C . Wir erhalten damit den Zusammenhang zwischen Zeitentwicklungsoperator und Resolvente:

$$U(t) = \frac{i}{2\pi} \int_C dz e^{-izt} R(z) \quad (102)$$

$$\xrightarrow{C} \quad R(z) = \int_0^\infty dt e^{izt} U(t) \quad (103)$$

Analog können wir auch Vektoren via C-Transformation miteinander verbinden:

$$|\psi(t)\rangle = \frac{i}{2\pi} \int_C dz e^{-izt} |\check{\psi}(z)\rangle \quad (104)$$

$$\xrightarrow{C} \quad |\check{\psi}(z)\rangle = \int_0^\infty dt e^{izt} |\psi(t)\rangle \quad (105)$$

Und schließlich läßt sich die Schrödingergleichung C-transformieren:

$$\frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle = H |\psi(t)\rangle \quad (106)$$

$$\xrightarrow{C} \quad |\check{\psi}(z)\rangle = \frac{1}{z - H} |\psi_0\rangle \quad (107)$$

wobei wieder $|\psi_0\rangle$ der Zustand zum Zeitpunkt $t = 0$ ist.

Die Relationen erlauben nun eine anschauliche Interpretation: Es gibt zwei *Bilder*, in welchem die Dynamik eines Systems beschreibbar ist: ein **Zeitbild**, in welchem die zeitliche Abhängigkeit der Vektoren durch die Schrödingergleichung bestimmt wird, und ein **C-Bild**, in dem eine Resolventengleichung die Abhängigkeit der Vektoren von einem komplexen Parameter regelt.

Die “Bewegungsgleichungen” in beiden Bildern lauten:

$$\text{Zeitbild:} \quad |\psi(t)\rangle = U(t) |\psi_0\rangle \quad (108)$$

$$\text{C-Bild:} \quad |\check{\psi}(z)\rangle = R(z) |\psi_0\rangle \quad (109)$$

5.1 Spektralzerlegungen

Sei $|E\rangle$ ein verallgemeinerter Eigenvektor von H , d.h.

$$H|E\rangle = E|E\rangle \quad , \quad (110)$$

dann ergibt sich

$$U(t) = \frac{i}{2\pi} \int_C dz \frac{e^{-izt}}{z - E} |E\rangle \quad . \quad (111)$$

Das Integral läßt sich mit dem Residuensatz berechnen. Weil C den Punkt E einmal im Uhrzeigersinn umläuft, erhält man

$$U(t)|E\rangle = \frac{i}{2\pi} \left[-2\pi i \operatorname{Res}_E \left(\frac{e^{-izt}}{z - E} \right) \right] |E\rangle \quad (112)$$

$$= e^{-iEt} |E\rangle \quad (113)$$

Mit der Spektralzerlegung des Hamiltonoperators

$$H = \int d\sigma(E) E |E\rangle \langle E| \quad (114)$$

ergibt sich in der Tat

$$U(t) = \frac{i}{2\pi} \int_C dz \int d\sigma(E) \frac{e^{-izt}}{z - E} |E\rangle \langle E| \quad (115)$$

$$= \int d\sigma(E) e^{-iEt} |E\rangle \langle E| = e^{-iHt} \quad . \quad (116)$$

Dabei ist $\int d\sigma(E)$ das Riemann-Stieltjes-Integral über die die Spektralfunktion von H von $-\infty$ bis $+\infty$. Dazu ein paar Worte:

Definition 6 Das **Riemann-Stieltjes-Integral** mit einer "Maßfunktion" $\mu(x)$ von beschränkter Variation ist definiert durch eine Zerlegung $Z_n = (x_1 < \dots < x_n)$, $\Delta_n x = \max\{(x_i - x_{i-1}) \mid x_i, x_{i-1} \in Z_n\}$, so daß

$$\int_a^b d\mu(x) f(x) := \lim_{\Delta_n x \rightarrow 0} \sum_{x_i, x_{i-1} \in Z_n} f(x_i) [\mu(x_i) - \mu(x_{i-1})] \quad . \quad (117)$$

Ist die Maßfunktion differenzierbar, dann ist

$$d\mu(x) = \mu'(x) dx \quad (118)$$

und das Integral wird über $\mu'(x) dx$ ausgeführt. Aber auch wenn $\mu(x)$ nicht differenzierbar ist, existiert das Riemann-Stieltjes-Integral.

Sei nun $\sigma(A)$ das Spektrum einer Observablen A , $\sigma_d(A)$ das diskrete und $\sigma_c(A)$ das kontinuierliche Spektrum von A , $s(a)$ eine komplexwertige Funktion über dem Spektrum $\sigma(A)$ von A , die speziell über dem kontinuierlichen Spektrum $\sigma_c(A)$ differenzierbar ist. Dann definieren wir eine **Spektralfunktion** $\sigma : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ via

$$\sigma(a) = \sum_{a_k \in \sigma_d(A)} s(a_k) \theta(a - a_k) + s(a) \cdot 1_{\sigma_c(A)}(a) \quad , \quad (119)$$

wobei

$$1_{\sigma_c(A)}(a) = \begin{cases} 1 & ; a \in \sigma_c(A) \\ 0 & ; \text{sonst} \end{cases} \quad (120)$$

die Indikatorfunktion über dem kontinuierlichen Spektrum und

$$\theta(a - a_k) = \begin{cases} 1 & ; a \geq a_k \\ 0 & ; \text{sonst} \end{cases} \quad (121)$$

die Heaviside-Stufenfunktion ist. Die Spektralfunktion hat die angenehme Eigenschaft, daß man sich nicht mehr um eine Unterscheidung in diskrete und kontinuierliche Eigenwerte kümmern muß und beide in einer Integration von $-\infty$ bis $+\infty$ zusammenfassen kann. Denn wenn $f(a)$ irgendeine (auch vektor- oder operatorwertige) Funktion ist, dann gilt

$$\int da \rho(a) f(a) = \sum_{a_k \in \sigma_d(A)} s(a_k) f(a_k) + \int_{a \in \sigma_c(A)} da s'(a) f(a) \quad . \quad (122)$$

Wenn wir die Ableitung der θ -Funktion im Distributionssinne durch

$$\frac{d}{da} \theta(a - a_k) := \delta(a - a_k) \quad (123)$$

definieren, dann können wir auch

$$d\sigma(s) = \rho(a) da \quad (124)$$

setzen, wobei

$$\rho(a) := \frac{d}{da} \sigma(a) \quad (125)$$

die **Spektraldichte** ist. Sie lautet dann:

$$\rho(a) = \sum_{a_k \in \sigma_d(A)} s(a_k) \delta(a - a_k) + s'(a) \cdot 1_{\sigma_c(A)}(a) \quad (126)$$

Sei nun $\{|a\rangle\}_a$ ein orthogonales, aber nicht unbedingt normiertes System von diskreten und kontinuierlichen Eigenvektoren von A . Die Orthogonalität wird ausgedrückt durch

$$\langle a|a'\rangle = \begin{cases} \frac{1}{s(a)}\delta_{aa'} & ; \text{für } a, a' \in \sigma_d(A) \\ \frac{1}{s'(a)}\delta(a - a') & ; \text{für } a, a' \in \sigma_c(A) \\ 0 & ; \text{sonst} \end{cases} . \quad (127)$$

Mit Hilfe der Spektraldichte läßt sich dies zusammenfassen zu

$$\boxed{\langle a|a'\rangle = \frac{1}{\rho(a)}\delta(a - a')} \quad (128)$$

Genau wie $\rho(a)$ ist die rechte Seite eine Distribution, die ihren Sinn durch

$$\int da \frac{1}{\rho(a)}\delta(a - a')f(a) = \begin{cases} \frac{f(a')}{s(a')} & ; a' \in \sigma_d(A) \\ \frac{f(a')}{s'(a')} & ; a' \in \sigma_c(A) \end{cases} \quad (129)$$

erhält. Da A selbstadjungiert ist, ist das System vollständig, d.h.

$$\boxed{\int da \rho(a) |a\rangle\langle a| = \mathbb{1}} . \quad (130)$$

Damit schreibt sich die **Spektralzerlegung** von A als

$$A = \int da \rho(a) a |a\rangle\langle a| . \quad (131)$$

und eine operatorwertige Funktion $f(A)$ läßt sich definieren über

$$f(A) := \int da \rho(a) f(a) |a\rangle\langle a| \quad (132)$$

Im Falle des mikroskopischen Modells für das Zwei-Niveau-System im Strahlungsfeld ist uns ja eine Spektraldichte $\rho(\nu, \vartheta)$ begegnet. Wir hätten sie auch im Friedrichsmodell immer mitführen können, was aber keine qualitativ anderen Ergebnissen erbracht hätte. Wir müßten nur an jeder Stelle $d\sigma(\omega)$ statt $d\omega$ schreiben und ferner ω als zweidimensionalen Vektor $\omega = (\nu, \vartheta)$ auffassen. In den meisten Anwendungen wird die Spektraldichte trivialerweise als konstant 1 und ohne Sprünge angenommen, was einem *normierten* System von uneigentlichen Eigenvektoren entspricht. Die obigen Überlegungen vereinfachen sich dann zu $\rho(a) = 1$ und $\langle a|a'\rangle = \delta(a - a')$. Man benötigt nichttriviale Spektralfunktionen bzw. -dichten im Grunde nur für gemischte Spektren und für Systeme von nicht normierten Eigenvektoren.

5.2 Eigenschaften der Resolvente

Der Hamiltonoperator zerfalle wieder einmal in einen freien Operator H_0 und einen Störoperator W ,

$$H = H_0 + W \quad , \quad (133)$$

so daß neben der Gesamtresolvente

$$R(z) := \frac{1}{z - H} \quad (134)$$

noch eine *freie Resolvente*

$$R_0(z) := \frac{1}{z - H_0} \quad (135)$$

zur Verfügung steht. Ferner seien die Eigenwerte und Eigenvektoren von H durch

$$H|\psi(E)\rangle = E|\psi(E)\rangle \quad , E \in \sigma \quad (136)$$

gegeben, wobei $\sigma = \sigma(H)$ das Spektrum von H ist. Die Eigenwerte und -vektoren von H_0 seien durch

$$H_0|E\rangle = E|E\rangle \quad , E \in \sigma_0 \quad (137)$$

gegeben, wobei $\sigma_0 = \sigma(H_0)$ das Spektrum von H_0 ist. Die Eigenvektoren $|E\rangle$ von H_0 nennen wir *freie Zustände*.

Wir führen nun einige sehr nützliche Eigenschaften der Resolvente als operatorwertige Funktion über der Resolventenmenge $\varrho = \varrho(H)$ auf:

- i) $R(z)$ ist holomorph auf ϱ und linear beschränkt auf \mathcal{H} .
- ii) $R(z) = \mathbb{1} + zR(z)$
- iii) $[A, R] = 0 \Leftrightarrow [A, H] = 0$, insbesondere $HR = RH$.
- iv) *Erste Resolventenidentität:*

$$R(z) - R(z') = (z - z')R(z)R(z') \quad (138)$$

- v) *Zweite Resolventenidentität:*

$$R = R_0 + R_0WR \quad (139)$$

$$= R_0 + RW R_0 \quad (140)$$

- vi) *Erste von-Neumann-Reihe*

$$R(z) = \sum_{n=0}^{\infty} (z - z_0)^n R(z_0)^{n+1} \quad (141)$$

vii) *Zweite von-Neumann-Reihe*

$$R = R_0 \sum_{n=0}^{\infty} (WR_0)^n \quad (142)$$

$$= \sum_{n=0}^{\infty} (R_0W)^n R_0 \quad (143)$$

5.3 Green-Operatoren

Die Resolvente des Hamiltonoperators ist auf der Resolventenmenge beschränkt. Gerade an den Stellen der reellen Achse, wo das Spektrum von H liegt, ist sie jedoch nicht beschränkt oder existiert nicht einmal, und dabei sind gerade dies die interessanten Stellen. Immerhin ist die Resolvente auf dem kontinuierlichen Spektrum definierbar, wenn sie auch dann ihre Beschränktheit verliert. Im Sinne einer Distribution ist sie vielleicht auch auf dem diskreten Spektrum definierbar. Man könnte also versucht sein, die Resolvente auf das gesamte Spektrum fortzusetzen. Da dieses auf der reellen Achse liegt, gibt es genau zwei Möglichkeiten, nämlich eine Fortsetzung von oben oder von unten. Man definiert je eine operatorwertige Distribution $G^{\pm}(E)$ über der reellen Achse, die durch analytische Fortsetzung der Resolvente auf \mathbb{R} von oben bzw. von unten hervorgeht:

Definition 7 (Green-Operator) Für $E \in \mathbb{R}$ sind die **Green-Operatoren** $G^{\pm}(E)$ des Hamiltonoperators H definiert durch

$$G^{\pm}(E) := R(E \pm i\epsilon) \quad (144)$$

$$= \frac{1}{E \pm i\epsilon - H} \quad . \quad (145)$$

Dabei wollen wir hier, wie im folgenden auch, stets ϵ als infinitesimale positive Größe betrachten, d.h. $\epsilon \rightarrow +0$ lesen. Auf dem Teil der reellen Achse, wo kein Spektrum liegt, stimmen die Fortsetzungen überein, da die Resolvente dort holomorph ist:

$$\text{auf } \mathbb{R} \setminus \sigma : \quad G^+(E) = G^-(E) \quad (146)$$

Wenn wir die Beziehung

$$\frac{1}{x \pm i\epsilon - x_0} = \frac{\mathcal{P}_{x_0}}{x - x_0} \mp i\pi\delta(x - x_0) \quad (147)$$

ausnutzen, können wir die Green-Operatoren schreiben als

$$\boxed{G^{\pm}(E) = \frac{\mathcal{P}_E}{E - H} \mp i\pi\delta(E - H) \quad .} \quad (148)$$

Dabei ist \mathcal{P}_E die Prinzipalwert-Distribution, definiert durch

$$\int_a^b dE' \mathcal{P}_E f(E') := \mathcal{P}_E \int_a^b dE' f(E') = \left\{ \int_a^{E-\epsilon} + \int_{E+\epsilon}^b \right\} dE' f(E') \quad (149)$$

und $\delta(E - H)$ eine operatorwertige δ -Distribution mit der Erklärung

$$\delta(E - H)|\psi(E')\rangle = \delta(E - E')|\psi(E')\rangle \quad . \quad (150)$$

Wir wenden diese Distribution auf die Einheit an:

$$\delta(E - H)\mathbb{1} = \int dE' \rho(E') \delta(E - H)|\psi(E')\rangle\langle\psi(E')| \quad (151)$$

$$= \int dE' \rho(E') \delta(E - E')|\psi(E')\rangle\langle\psi(E')| \quad (152)$$

$$= \rho(E)|\psi(E)\rangle\langle\psi(E)| \quad (153)$$

Man erhält also die Identität

$$\boxed{\delta(E - H) = \rho(E)|\psi(E)\rangle\langle\psi(E)|} \quad (154)$$

Diese Distribution ist für jedes reelle E definiert, umfaßt also diskrete und kontinuierliche Eigenvektoren. Es ergibt sich sofort für eine Funktion $f(E)$:

$$\int dE \delta(E - H)f(E) := f(H) \quad . \quad (155)$$

Die beiden Green-Operatoren sind zueinander adjungiert,

$$(G^\pm)^\dagger = G^\mp \quad (156)$$

und ihre Differenz ergibt

$$G^+(E) - G^-(E) = -2\pi i \delta(E - H) \quad . \quad (157)$$

Die letzte Eigenschaft machen wir uns zunutze. Der Zeitentwicklungsoperator $U(t)$ war ja als C-Transformierte der Resolvente $R(z)$ darstellbar:

$$U(t) = \frac{i}{2\pi} \int_C dz e^{-izt} R(z) \quad . \quad (158)$$

Da nun C aus dem positiv Unendlichen (knapp unterhalb der reellen Achse) kommt und im Uhrzeigersinn um das Spektrum von H herum zurück ins positiv Unendliche (knapp oberhalb der reellen Achse) führt, können wir die beiden Teilintegrale des Hin- und Rückweges auch auf dem Spektrum selbst ausführen, wenn der Integrand jeweils die analytische Fortsetzung

der Resolvente von unten bzw. von oben ist. Dies sind gerade die Green-Operatoren. Die Integration verlauft vom kleinsten Eigenwert E_{min} von H bis ins positiv Unendliche. Weil die Resolvente aber auf dem Teil der reellen Achse *unterhalb* von E_{min} holomorph ist, kann das Integral auch von jedem beliebigen Punkt $x_0 < E_{min}$ ausgehen (die Integrationskurve ist ja innerhalb des Holomorphiegebietes beliebig verformbar). Im Grenzfall last sich das Integral ber die gesamte reelle Achse erstrecken:

$$U(t) = \frac{i}{2\pi} \int dE e^{-iEt} \{G^+(E) - G^-(E)\} \quad . \quad (159)$$

Mit der Relation (157) folgt dann in der Tat

$$U(t) = \frac{i}{2\pi} \int dE e^{-iEt} (-2\pi i) \delta(E - H) = e^{-iHt} \quad . \quad (160)$$

Der Green-Operator tragt seinen Namen nicht ohne Grund. Allgemein nennt man die *Rechtsinversen* G_A eines Operators A *Green-Operatoren* von A , d.h.

$$A G_A = \mathbb{1} \quad (161)$$

Falls A invertierbar ist, gibt es nur einen Green-Operator, namlich die Inverse A^{-1} . Hier ist $G^\pm(E)$ der Green-Operator zum Operator $(E - H)$, der die *zeitunabhangige Schrodingergleichung*

$$(E - H)|\psi(E)\rangle = |o\rangle \quad (162)$$

formuliert. Wir multiplizieren $(E - H)$ von rechts mit $G^\pm(E)$:

$$(E - H)G^\pm(E) = (E - H) \left\{ \frac{\mathcal{P}_E}{E - H} \mp i\pi\delta(E - H) \right\} \quad (163)$$

$$= \mathcal{P}_E \mp \mathbb{0} = \mathbb{1} \quad (164)$$

Der Prinzipalwert-Operator hat nichts zu tun, weil es keine Singularitaten mehr gibt und wird zum Einheitsoperator. Damit gilt in der Tat

$$(E - H)G^\pm(E) = \mathbb{1} \quad (165)$$

5.4 Moller-Operatoren

Die Resolvente ist nicht nur nutzlich, um die Eigenwerte des Hamiltonoperators herauszufinden oder um Rechtsinversen zu konstruieren, sie hilft sogar dabei, Eigenvektoren zu finden. Wir definieren einen **Eingangszustand** $|\psi^+(E)\rangle$ und einen **Ausgangszustand** $|\psi^-(E)\rangle$ als ‘‘Residualvektoren’’ an den kritischen Stellen der Resolvente, d.h. den Spektralpunkten von H :

$$E \in \sigma(H) : \quad |\psi^\pm(E)\rangle := \lim_{z \rightarrow E \pm i\epsilon} (z - E)R(z)|\varphi\rangle \quad (166)$$

$$= \frac{\pm i\epsilon}{E \pm i\epsilon - H} |\varphi\rangle \quad (167)$$

Die rechte Seite ist nur dann ungleich dem Nullvektor, wenn entweder

$$1. \quad \lim_{z \rightarrow E} \|R(z)|\varphi\rangle\| \rightarrow \infty \quad (168)$$

gilt, d.h. die Resolvente existiert nicht bei $z = E$ und damit ist z ein diskreter Eigenwert von H , oder

$$2. \quad \|R(E)|\varphi_n\rangle\| \rightarrow \infty \quad (|\varphi_n\rangle \rightarrow |\varphi\rangle) \quad (169)$$

gilt, d.h. die Resolvente existiert zwar bei $z = E$ ist dort aber nicht beschränkt, womit E ein kontinuierlicher Eigenwert ist. Die Folge $|\varphi_n\rangle$ definiert einen uneigentlichen Vektor $|\varphi\rangle$ als deren Grenzelement. Dessen Bild unter $R(E)$ ist dann ebenfalls ein uneigentlicher Vektor. Zusammengefaßt: Die Gleichung macht nur Sinn, falls $|\psi^\pm(E)\rangle$ und $|\varphi\rangle$ entweder beide normierbare oder beide uneigentliche Vektoren sind. Außerdem darf $|\varphi\rangle$ natürlich nicht der Nullvektor sein. Ansonsten ist aber die Wahl von $|\varphi\rangle$ freigestellt. Die Ein- und Ausgangszustände sind Eigenvektoren des Gesamt-Hamiltonoperators H zum Eigenwert E :

$$H|\psi^\pm(E)\rangle = E|\psi^\pm(E)\rangle \quad (170)$$

Dies sieht man, wenn man den Operator $(E \pm i\epsilon - H)$ auf sie wirken läßt:

$$(E \pm i\epsilon - H)|\psi^\pm(E)\rangle = (E \pm i\epsilon - H) \frac{i\epsilon}{(E \pm i\epsilon - H)} |\varphi\rangle = i\epsilon |\varphi\rangle = |o\rangle \quad (171)$$

$$\Rightarrow \quad H|\psi^\pm(E)\rangle = E|\psi^\pm(E)\rangle \quad \square \quad (172)$$

Die Operatoren Ω^\pm , die zwischen den freien Zuständen (den Eigenvektoren von H_0) und den Ein- und Ausgangszuständen (den Eigenvektoren von H) vermitteln, nennt man **Møller-Operatoren**:

$$|\psi^\pm(E)\rangle = \Omega^\pm |E\rangle \quad (173)$$

Sie lassen sich in der Form

$$\Omega^\pm = \int dE \rho(E) |\psi^\pm(E)\rangle \langle E| \quad (174)$$

darstellen. Ihre Matrixelemente in der freien Basis $\{|E\rangle\}_{E \in \sigma_0}$ sind:

$$\Omega^\pm(E, E') = \langle E | \psi^\pm(E') \rangle \quad (175)$$

Da H ein selbstadjungierter Operator ist, bilden seine Eigenvektoren $\{|\psi^\pm(E)\rangle\}_{E \in \sigma}$ jeweils ein vollständiges System, so daß

$$\int dE \rho(E) |\psi^\pm(E)\rangle \langle \psi^\pm(E)| = \mathbb{1} \quad (176)$$

Da die freien Zustände $|E\rangle$ bekannt sind, entspricht die Kenntnis eines Møller-Operators der Lösung des Eigenwertproblems von H und damit auch der Schrödingergleichung.

5.5 Lippmann-Schwinger-Gleichungen und Bornsche Reihe

Wenn man die 2. Resolventenidentität in der Form

$$R = (\mathbb{1} + RW)R_0 \quad (177)$$

1.) von rechts mit $(z - H_0)$ multipliziert,

$$R(z)(z - H_0) = \mathbb{1} + R(z)W \quad , \quad (178)$$

2.) auf den freien Zustand $|E\rangle$ wirken läßt,

$$R(z)(z - E)|E\rangle = |E\rangle + R(z)W|E\rangle \quad , \quad (179)$$

und schließlich

3.) $z \rightarrow E \pm i\epsilon$ gehen läßt,

erhält man die

1. Lippmann-Schwinger-Gleichung

$$|\psi^\pm(E)\rangle = |E\rangle + G^\pm(E)W|E\rangle \quad (180)$$

Diese Gleichung erlaubt die direkte Konstruktion der Eigenvektoren von H , falls die Resolvente bekannt ist. Wenn man von der 2. Resolventenidentität in der Form

$$R = R_0(\mathbb{1} + WR) \quad (181)$$

ausgeht und dieselbe Prozedur wie oben durchführt, gelangt man zur

2. Lippmann-Schwinger-Gleichung

$$|\psi^\pm(E)\rangle = |E\rangle + G_0^\pm(E)W|\psi^\pm(E)\rangle \quad (182)$$

Dabei haben wir den *freien Green-Operator*

$$G_0^\pm(E) := R_0(E \pm i\epsilon) \quad (183)$$

eingeführt. Diese Gleichung ist eine implizite Gleichung für die Eigenvektoren $|\psi^\pm(E)\rangle$ von H , mit der sich eine Rekursion durchführen läßt. Das Ergebnis ist die

Bornsche Reihe

$$|\psi^\pm(E)\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} \{G_0^\pm(E)W\}^n |E\rangle \quad (184)$$

Man erhält die Bornsche Reihe auch auf anderem Weg unter Verwendung der 2. von-Neumann-Reihe

$$R = \sum_{n=0}^{\infty} \{R_0 W\}^n R_0 \quad , \quad (185)$$

die man ebenfalls ebenfalls der oben angeführten Prozedur unterzieht. Die Bornsche Reihe ermöglicht die Konstruktion von approximativen Eigenvektoren von H , die einer Störreihe entsprechen, da sie nach Potenzen von W geordnet sind:

$$\text{N-te Ordnung:} \quad |\psi^{\pm(N)}(E)\rangle = \sum_{n=0}^N \{G_0^{\pm}(E)W\}^n |E\rangle \quad . \quad (186)$$

5.6 S-Matrix

Zuletzt definieren wir noch einen Operator S via

$$S := (\Omega^-)^{\dagger} \Omega^+ \quad (187)$$

und nennen ihn die **S-Matrix**. Die Matrixelemente von S bezüglich der Basis $\{|E\rangle\}_{E \in \sigma_0}$ der freien Zustände sind die Übergangsamplituden zwischen Eingangs- und Ausgangszuständen:

$$S(E, E') = \langle E|S|E'\rangle = \langle \psi^-(E)|\psi^+(E')\rangle \quad . \quad (188)$$

Dem entspricht die Zerlegung

$$S = \int dE \rho(E) \int dE' \rho(E') |E\rangle \langle \psi^-(E)|\psi^+(E')\rangle \langle E'| \quad . \quad (189)$$

Wenn keine Störung vorliegt, also wenn $[W, H_0] = 0$ gilt, dann folgt

$$H|E\rangle = (H_0 + W)|E\rangle = (E + E_W)|W\rangle = H_{tot}|E\rangle \quad (190)$$

und demnach

$$|\psi^{\pm}(E)\rangle = |E\rangle \quad (191)$$

$$\Omega^{\pm} = \mathbb{1} \quad (192)$$

$$S = \mathbb{1} \quad . \quad (193)$$

Je stärker die Streuung, umso mehr weicht die S-Matrix von der Einheitsmatrix ab.

5.7 Zeitbild und Energiebild

Mit den Ergebnissen der letzten Abschnitte kann man als Spezialfall des C-Bildes ein *Energiebild* konstruieren. Wie wir bereits sahen, gibt es für den Zeitentwicklungsoperator die Darstellung

$$U(t) = \frac{i}{2\pi} \int dE e^{-iEt} \{G^+(E) - G^-(E)\} \quad . \quad (194)$$

Das Integral läßt sich aufspalten und man definiert zwei **Green-Operatoren im Zeitbild**:

$$\mathcal{G}^\pm(t) := \frac{1}{2\pi} \int dE e^{-iEt} G^\pm(E) \quad , \quad (195)$$

so daß

$$U(t) = i\mathcal{G}^+(t) - i\mathcal{G}^-(t) \quad (196)$$

erfüllt ist. Um die Integrale auszurechnen, lassen wir sie auf einen Eigenvektor $|\psi(E)\rangle$ von H wirken:

$$\mathcal{G}^\pm(t)|\psi(E)\rangle = \frac{1}{2\pi} \int dE' \frac{e^{-iE't}}{E' \pm i\epsilon - E} |\psi(E)\rangle \quad (197)$$

Nun muß man eine Fallunterscheidung treffen:

Für den **retardierten Green-Operator** $\mathcal{G}^+(t)$ liegt die Polstelle bei $E' = E - i\epsilon$.

- Falls $t > 0$ ist, kann man das Integral mittels Residuensatz lösen, indem man den Integrationsweg längs der reellen Achse durch einen unendlichen Halbkreis in der unteren Halbebene von $+\infty$ nach $-\infty$ ergänzt, der keinen Beitrag zur Integration liefert. Weil der Pol in der unteren Halbebene liegt, wird er vom Integrationsweg einmal im negativen Sinn umlaufen und man erhält nach dem Residuensatz:

$$\mathcal{G}^+(t)|\psi(E)\rangle = \frac{1}{2\pi} (-2\pi i) e^{-i(E+i\epsilon)t} |\psi(E)\rangle \quad (198)$$

$$= -i e^{-iEt} |\psi(E)\rangle \quad (199)$$

- Falls $t < 0$ ist, kann man einen Halbkreis in der oberen Halbebene schließen. Da der Pol nicht umschlossen wird, ist das Integral gleich Null und wenn man noch die Vollständigkeit des Systems von Eigenvektoren benutzt, erhält man insgesamt

$$\mathcal{G}^+(t) = -i\theta(t) e^{-iHt} \quad . \quad (200)$$

Für den **avancierten Green-Operator** $\mathcal{G}^-(t)$ liegt der Pol bei $E' = E + i\epsilon$, also in der oberen Halbebene. Analoge Prozeduren führen zu dem Ausdruck

$$\mathcal{G}^-(t) = i\theta(-t)e^{-iHt} \quad (201)$$

Man prüft schnell nach, daß $\mathcal{G}^\pm(t)$ Green-Operatoren zum Operator $(i\frac{\partial}{\partial t} - H)$ sind, der die *zeitabhängige Schrödinger-Gleichung*

$$(i\frac{\partial}{\partial t} - H)|\psi(t)\rangle = |o\rangle \quad (202)$$

formuliert. Es gilt nämlich

$$(i\frac{\partial}{\partial t} - H)\mathcal{G}^\pm(t) = \delta(t) \quad (203)$$

Somit ist der Initialzustand $|\psi_0\rangle$ aus dem Zustand $|\psi(t)\rangle$ durch

$$\int dt (i\frac{\partial}{\partial t} - H)\mathcal{G}^\pm(t)|\psi(t)\rangle = |\psi_0\rangle \quad (204)$$

rekonstruierbar.

5.8 Zusammenhang mit der Fourier-Transformation

Die Green-Operatoren im Zeit- und Energiebild sind offenbar zueinander *fouriertransformiert*, wenn man vor der Zeitintegration einen exponentiellen Abfall bzw. Anstieg einschaltet, den man danach wieder konstant werden läßt:

$$G^\pm(E) = \int dt e^{iEt} e^{\mp\epsilon t} \mathcal{G}^\pm(t) \quad (205)$$

$$\mathcal{G}^\pm(t) = \frac{1}{2\pi} \int dE e^{-iEt} G^\pm(E) \quad (206)$$

Allgemein kann man schnell überschauen, daß für C-transformierbare Funktionen $f(t)$, die für negative Zeiten verschwinden, bzw. für C-rücktransformierbare Funktionen $f(z)$ mit Polen und Schnitten auf der reellen Achse die C-Transformation zu einer Fouriertransformation wird. Dabei entstehen bei der Rücktransformation zwei Funktionen $f^\pm(t)$, die jeweils zu den analytischen Fortsetzungen $f^\pm(E)$ von oben bzw. unten auf die reelle Achse fouriertransformiert sind. Diese Funktionen sind i.a. Distributionen, da sie evtl. divergieren. Indem man die entsprechenden Residuen bildet, erhält man "vernünftige" Funktionen.

Im Zeitbild gilt:

$$f(t) = if^+(t) - if^-(t) \quad (207)$$

$$f^+(t) = -if(t)\theta(t) \quad (208)$$

$$f^-(t) = if(t)\theta(-t) \quad (209)$$

Im C- bzw. Energiebild dagegen:

$$\check{f}(z) = \mathbb{C}\{f(t)\} \quad (210)$$

$$g^+(E) = -i\check{f}(E + i\epsilon) \quad (211)$$

$$g^-(E) = i\check{f}(E - i\epsilon) \quad (212)$$

$$\text{Residuen:} \quad h^\pm(E) = \mp i\epsilon \check{f}(E \pm i\epsilon) \quad (213)$$

Mit dem Zusammenhang

$$g^+(E) = \mathbb{F}\{-i\theta(t)e^{-\epsilon t}f(t)\} \quad (214)$$

$$g^-(E) = \mathbb{F}\{i\theta(-t)e^{-\epsilon t}f(t)\} \quad (215)$$

In der Übersicht (siehe auch Abb. ??) haben wir damit folgende Entsprechungen:

Zeitbild:	$\mathcal{G}^\pm(t) = \mp i\theta(\pm t)U(t)$	(216)
	$ \psi(t)\rangle = U(t) \psi_0\rangle$	(217)
Energiebild:	$G^\pm(E) = R(E \pm i\epsilon)$	(218)
	$ \psi^\pm(E)\rangle = \pm i\epsilon R(E \pm i\epsilon) \varphi\rangle$	(219)
Transformation:	$G^\pm(E) = \int dt e^{i(E \pm i\epsilon)t} \mathcal{G}^\pm(t)$	(220)
	$\mathcal{G}^\pm(t) = \frac{1}{2\pi} \int dE e^{-iEt} G^\pm(E)$	(221)

Im Zeitbild gilt: Der *retardierte* Green-Operator regelt die Entwicklung der Zustände *in die Zukunft*, der *avancierte* Green-Operator in die *Vergangenheit*.

Im Energiebild gilt: Die analytische Fortsetzung der Resolvente *von oben* entspricht dem *retardierten* Green-Operator im Zeitbild, bezeichnen wir ihn also ruhig ebenfalls als *retardiert*. Analog dazu entspricht der *avancierte* Green-Operator im Zeitbild der analytischen Fortsetzung der Resolvente *von unten*; wir wollen ihn auch als *avanciert* bezeichnen.

5.9 Essenz

Funktionen in Zeit- und C-Bild hängen über eine C-Transformation zusammen, (z.B. Zeitentwicklungsoperator und Resolvente). Wenn man die

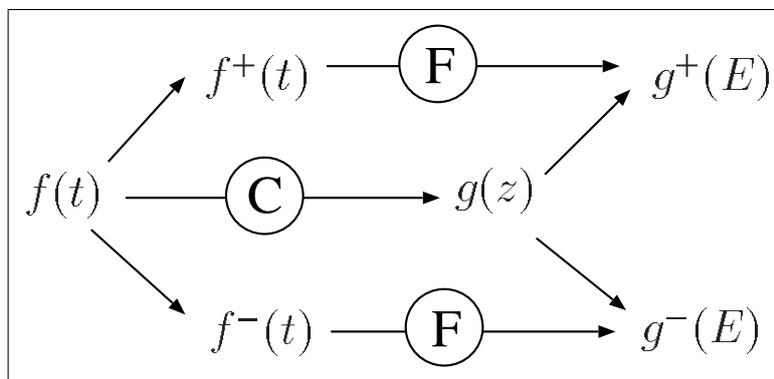


Abbildung 7: Zusammenhang der C-Transformation mit der Fouriertransformation.

Funktionen im C-Bild von oben bzw. unten auf die reelle Achse fortsetzt, entstehen zwei verschiedene Funktionen im Energiebild. Diese Funktionen sind jeweils invers fouriertransformiert zu Funktionen, die die positive bzw. negative Halbachse zum Träger haben. Das Auseinanderfallen einer Entwicklung in die Zukunft und in die Vergangenheit im Zeitbild entspricht der Existenz zweier möglicher Fortsetzungen der Resolvente auf die reelle Achse im C-Bild, also der Existenz zweier verschiedener (durch die jeweiligen Fortsetzungen definierter) Green-Operatoren im Energiebild, deren Fouriertransformation eben zwei verschiedene (in die Zukunft- bzw. Vergangenheit gerichtete) Zeitentwicklungsoperatoren liefert. Dieses Auseinanderfallen ist intrinsisch und hat ihre Ursache in der Tatsache, daß Hamiltonoperatoren ihr Spektrum (so wie alle Observablen) auf der reellen Achse haben und daß dieses Spektrum nach unten beschränkt ist. Denn wäre das Spektrum nicht nach unten beschränkt, wäre die Umformung des Integrationsweges von Z (oberhalb der reellen Achse) nach C (um das Spektrum herum) nicht möglich und es gäbe keine Fortsetzung von unterhalb des Integrationsweges auf die reelle Achse und damit auch keine zwei Green- und Zeitentwicklungsoperatoren.