

2.4 Eigenschaften des Propagators

Um mit der Literatur in Übereinstimmung zu sein, führen wir zunächst einen Notationswechsel ein:

Wir bezeichnen den retardierten Zeitentwicklungsoperator nun mit

$$\hat{G}(t) := \hat{U}_R(t) = \Theta(t) e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H} t}, \quad t = t_b - t_a \quad (2.63)$$

(für zeitunabh. Hamilton-Operatoren), da diese die Green'sche Funktion des Schrödingers-Operators ist. Die Verknüpfungseigenschaft lautet dann

$$\hat{G}(t+s) = \hat{G}(t) \hat{G}(s), \quad t, s > 0. \quad (2.64)$$

Im Ortsraumbasis schreiben wir:

$$G(x_b, t_b; x_a, t_a) := \langle x_b | \hat{G}(t_b - t_a) | x_a \rangle \quad (2.65)$$

$$\begin{matrix} \text{sei } t_a = 0 \\ \Rightarrow \\ x_b = x, x_a = y \end{matrix} \quad G(x, t+s; y, 0) = \int dz \, G(x, t; z, s) G(z, s; y, 0).$$

Nun sei angenommen, daß wir über die vollständigen Energieeigenzustände $|n\rangle$ verfügen:

$$\hat{H} |n\rangle = E_n |n\rangle. \quad (2.66)$$

Die zugehörigen Ortsraumwellenfunktionen lauten

$$\psi_n(x) = \langle x | n \rangle, \quad (2.67)$$

und seien normiert:

$$\int dx |\psi_n(x)|^2 = 1. \quad (2.68)$$

Damit läßt sich der Propagator schreiben als

$$\begin{aligned} G(x, t; y, 0) &= \langle x | \hat{G}(t) | y \rangle = \sum_n \langle x | n \rangle \langle n | e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H} t} | y \rangle \\ &= \sum_n \psi_n(x) e^{-\frac{i}{\hbar} E_n t} \psi_n^*(y). \end{aligned} \quad (2.69)$$

Diese Formel macht die Verknüpfung des Propagators mit den "üblichen" Größen wie die Wellenfunktionen und den Energieniveaus deutlich.

Betrachten wir zunächst die Fourier-Transformierte von G : (Operator-Hüte "1" werden nun unterdrückt)

$$\tilde{G}(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{\frac{i}{\hbar} \omega t} G(t) = \int_0^{\infty} dt e^{\frac{i}{\hbar} (\omega - H) t}. \quad (2.70)$$

Für $\text{Im } \omega > 0$ läßt sich das Integral ausführen:

$$\tilde{G}(\omega) = \frac{i\hbar}{\omega - H}, \text{ oder explizit: } \tilde{G}(\omega) = \frac{i\hbar}{\omega - H + i\varepsilon}. \quad (2.71)$$

$\omega \rightarrow \omega + i\varepsilon; \omega, \varepsilon \in \mathbb{R}, \varepsilon > 0$

(NB: für anti-kausale "avancierte" Propagatoren mit $t < 0$ muß man $\omega \rightarrow \omega - i\varepsilon$ wählen)

Im Ortsraum folgt entsprechend aus (2.69):

$$\tilde{G}(x, y; \omega) = i\hbar \sum_n \frac{\psi_n(x) \overline{\psi_n(y)}}{\omega - E_n + i\varepsilon} \quad (2.72)$$

- $\Rightarrow$
- Pole des Propagators im Fourier-Raum entsprechen den diskreten Energie-Niveaus gebundener Zustände.
 - Die zugehörigen Residuen entsprechen den jeweiligen Wellenfunktionen
 - Für ein kontinuierliches Spektrum (Streu Zustände) hat der Propagator einen Schnitt.

Mit Hilfe der Normierung von $\psi_n(x)$ folgt:

$$\int dx \quad G(x, t; x, 0) \stackrel{(2.69)}{=} \sum_n e^{-\frac{i}{\hbar} E_n t} \int dx |\psi_n(x)|^2 = \sum_n e^{-\frac{i}{\hbar} E_n t} \quad (2.73)$$

Es ist nützlich, diese Gleichung für komplexe t zu betrachten:

$$\tau := \frac{it}{\hbar} > 0 \quad (2.74)$$

Für große τ wird die Summe in (2.73)

dominiert durch den Term kleinste Energie:

$$\Rightarrow \lim_{\tau \rightarrow \infty} e^{E_0 \tau} \int dx G(x, -i\hbar \tau; x, 0) = 1, \quad (2.75)$$

für Systeme mit nicht-entarteten Grundzustand.

Für entartete Grundzustände steht rechts der Entartungsgrad.

Auf den Grundzustand wird projiziert durch

$$\begin{aligned} \underline{\underline{E_0}} &= - \lim_{\tau \rightarrow +\infty} \frac{1}{\tau} \log \int dx G(x, -i\hbar \tau; x, 0) \\ &= - \lim_{\tau \rightarrow \infty} \frac{1}{\tau} \log \text{Tr} \underline{\underline{e^{-\tau H}}}. \end{aligned} \quad (2.76)$$

(Feynman - Kac Formel)

- Zur Bestimmung der Grundzustandsenergie genügt der Propagator für asymptotisch große Zeiten.
- allgemein gilt: zur Bestimmung statischer Größen (wie die Energie stationärer Zustände) genügt es "Euklidische" imaginäre Zeiten zu betrachten ("Wick-rotierte" Zeit).

Beispiel: harmonischer Oszillator

Wir finden den Propagator:

$$G(x,t;y,0) \stackrel{(2.61)}{=} \sqrt{\frac{m\omega}{2\pi i \hbar \sin \omega t}} e^{\frac{i m \omega}{2 \hbar \sin \omega t} [(x^2 + y^2) \cos \omega t - 2xy]} \quad (2.77)$$

Mit (2.73) folgt:

$$\begin{aligned} \sum_n e^{-\frac{i}{\hbar} E_n t} &= \int dx G(x,t;x,0) = \sqrt{\frac{m\omega}{2\pi i \hbar \sin \omega t}} \int dx e^{\frac{i m \omega}{2 \hbar \sin \omega t} 2x^2 (\cos \omega t - 1)} \\ &= \frac{1}{2i} \left(\sin \frac{\omega t}{2} \right)^{-1} \\ &= \frac{e^{-\frac{i}{2} \omega t}}{1 - e^{-i \omega t}} = e^{-\frac{1}{2} i \omega t} \sum_{n=0}^{\infty} e^{-i n \omega t} \\ &\quad \uparrow_{it = \hbar \tau} \quad (2.78) \end{aligned}$$

Damit folgt für beliebige t :

$$E_n = \hbar \omega \left(n + \frac{1}{2} \right), \quad n=0,1,\dots \quad (2.79)$$