3 Green-Funktionen

Die Aufgabe der Theoretischen Physik besteht darin, Verfahren zur Berechnung physikalischer Meßgrößen zu entwickeln. **Physikalische Meßgrößen** sind:

1) die Eigenwerte von Observablen,

2) die Erwartungswerte von Observablen $\langle \widehat{A}(t) \rangle$, $\langle \widehat{B}(t') \rangle, \ldots,$

3) die Korrelationsfunktionen zwischen Observablen $\left\langle \widehat{A}(t) \cdot \widehat{B}(t') \right\rangle \ldots$

Im Rahmen der Statistischen Mechanik sind die Berechnungen von Meßgrößen vom Typ 2) oder 3) genau dann möglich, wenn die Zustandssumme des betrachteten physikalischen Systems bekannt ist. Dies setzt auf der anderen Seite die Kenntnis der Eigenwerte und Eigenzustände des Hamilton-Operators voraus, was bei realistischen Viel-Teilchen-Problemen in der Regel nicht gegeben ist. Die **Methode der Green-Funktionen** gestattet eine, im allgemeinen natürlich approximative, Bestimmung von Erwartungswerten und Korrelationsfunktionen **ohne** explizite Kenntnis der jeweiligen Zustandssumme. Entsprechende Verfahren werden in diesem und den folgenden Kapiteln besprochen. Dazu sind einige Vorbereitungen vonnöten, die zum Teil Wiederholungen aus den ersten Bänden dieser Reihe **Grundkurs: Theoretische Physik** sind.

3.1 Vorbereitungen

3.1.1 Bilder

Zur Beschreibung von Zeitabhängigkeiten physikalischer Systeme benutzt man, je nach Zweckmäßigkeit, eines der drei äquivalenten *Bilder*:

Schrödinger-, Heisenberg-, Dirac-Bild.

Wir beginnen mit dem Bild, das im Band **Quantenmechanik** fast ausschließlich verwendet wurde.

1) Schrödinger-Bild (Zustandsbild)

In diesem Bild wird die Zeitabhängigkeit von den Zuständen getragen, wohingegen die Operatoren zeitunabhängig sind, falls sie nicht *explizit* von der Zeit abhängen, z. B. durch Ein- und Ausschaltvorgänge. Wir übernehmen aus der elementaren Quantenmechanik die

Bewegungsgleichungen

a) für reine Zustände:

$$\mathrm{i}\hbar \, |\dot{\psi}_s(t)\rangle = H \, |\psi_s(t)\rangle \, , \tag{3.1}$$

b) für gemischte Zustände:

$$\dot{\rho}_S = \frac{\mathrm{i}}{\hbar} \big[\rho_S , H \big]_- . \tag{3.2}$$

Dabei ist ρ_S die **Dichtematrix** mit den bekannten Eigenschaften:

$$\rho_S = \sum_m p_m \, |\psi_m\rangle \, \langle \psi_m | \tag{3.3}$$

(p_m ist die Wahrscheinlichkeit, daß sich das System im Zustand $|\psi_m\rangle$ befindet),

$$\langle \widehat{A} \rangle = \mathrm{Sp}(\rho_s \widehat{A}), \tag{3.4}$$

$$\mathrm{Sp}\, \rho_s = 1, \tag{3.5}$$

$$\mathrm{Sp}\, \rho_s^2 = \begin{cases} 1: & \text{reiner Zustand,} \\ < 1: & \text{gemischter Zustand.} \end{cases} \tag{3.6}$$

Für das Folgende wichtig ist der

Zeitentwicklungsoperator $U_S(t, t_0)$,

der durch

$$|\psi_S(t)\rangle = U_S(t, t_0) \, |\psi_S(t_0)\rangle \tag{3.7}$$

definiert ist. Wichtige Eigenschaften dieses Operators sind:

1) $$U_S^+(t, t_0) = U_S^{-1}(t, t_0), \tag{3.8}$$

2) $$U_S(t_0, t_0) = \mathbf{1} \tag{3.9}$$

3) $$U_S(t, t_0) = U_S(t, t')U_S(t', t_0). \tag{3.10}$$

Benutzt man (3.7) in (3.1), so folgt eine äquivalente Bewegungsgleichung für den Zeitentwicklungsoperator:

$$\mathrm{i}\hbar\dot{U}_S(t,t_0) = H_t U_S(t,t_0). \tag{3.11}$$

Der Index t am Hamilton-Operator soll eine mögliche explizite Zeitabhängigkeit andeuten. (3.11) läßt sich unter Beachtung von (3.9) formal integrieren:

$$U_S(t,t_0) = \mathbf{1} - \frac{\mathrm{i}}{\hbar}\int\limits_{t_0}^{t} \mathrm{d}t_1\, H_{t_1} U_S(t_1,t_0). \tag{3.12}$$

Nach Iteration folgt die

von Neumannsche Reihe

$$U_S(t,t_0) = \mathbf{1} + \sum_{n=1}^{\infty} U_S^{(n)}(t,t_0), \tag{3.13}$$

$$U_S^{(n)}(t,t_0) = \left(-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\right)^n \int\limits_{t_0}^{t} \mathrm{d}t_1 \int\limits_{t_0}^{t_1} \mathrm{d}t_2 \cdots \int\limits_{t_0}^{t_{n-1}} \mathrm{d}t_n H_{t_1} H_{t_2} \cdots H_{t_n} \tag{3.14}$$

$$\big(t \ge t_1 \ge t_2 \ge \cdots \ge t_n \ge t_0\big).$$

Die Zeitordnung ist streng zu beachten, da die Operatoren H_{t_i} für verschiedene Zeiten nicht notwendig miteinander vertauschen.

Zur weiteren Umformung führen wir einen speziellen Operator ein:

Dysonscher Zeitordnungsoperator

$$T_D\big(A(t_1)B(t_2)\big) = \begin{cases} A(t_1)B(t_2) & \text{für } t_1 > t_2, \\ B(t_2)A(t_1) & \text{für } t_2 > t_1. \end{cases} \tag{3.15}$$

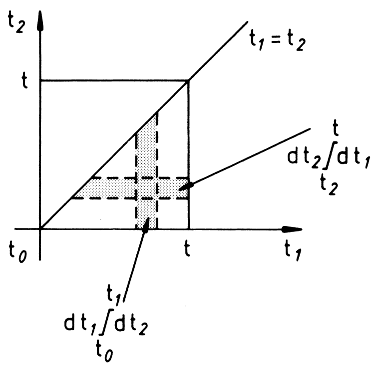

Abb. 3.1. Veranschaulichung zur Einführung des Zeitordnungsoperators in (3.14)

Die Verallgemeinerung auf mehr als zwei Operatoren liegt auf der Hand. An dem Bild macht man sich die folgenden Beziehungen klar:

$$\int_{t_0}^{t} \mathrm{d}t_1 \int_{t_0}^{t_1} \mathrm{d}t_2\, H_{t_1} H_{t_2} = \int_{t_0}^{t} \mathrm{d}t_2 \int_{t_2}^{t} \mathrm{d}t_1\, H_{t_1} H_{t_2}.$$

Auf der rechten Seite Zeile der Gleichung vertauschen wir t_1 und t_2:

$$\int_{t_0}^{t} \mathrm{d}t_1 \int_{t_0}^{t_1} \mathrm{d}t_2\, H_{t_1} H_{t_2} = \int_{t_0}^{t} \mathrm{d}t_1 \int_{t_1}^{t} \mathrm{d}t_2\, H_{t_2} H_{t_1}.$$

Dies bedeutet, wenn man die beiden letzten Beziehungen kombiniert:

$$\begin{aligned} &\int_{t_0}^{t} \mathrm{d}t_1 \int_{t_0}^{t_1} \mathrm{d}t_2\, H_{t_1} H_{t_2} = \\ &= \frac{1}{2} \int_{t_0}^{t} \mathrm{d}t_1 \int_{t_0}^{t} \mathrm{d}t_2 \Big(H_{t_1} H_{t_2} \Theta(t_1 - t_2) + H_{t_2} H_{t_1} \Theta(t_2 - t_1) \Big) = \qquad (3.16) \\ &= \frac{1}{2!} \iint_{t_0}^{t} \mathrm{d}t_1\, \mathrm{d}t_2\, T_D \big(H_{t_1} H_{t_2} \big). \end{aligned}$$

Dieses Ergebnis läßt sich auf n Terme verallgemeinern, so daß aus (3.14) nun wird:

$$U_S^{(n)}(t, t_0) = \frac{1}{n!} \left(-\frac{\mathrm{i}}{\hbar} \right)^n \int_{t_0}^{t} \cdots \int_{t_0}^{t} \mathrm{d}t_1 \cdots \mathrm{d}t_n\, T_D \big(H_{t_1} H_{t_2} \cdots H_{t_n} \big). \qquad (3.17)$$

Damit läßt sich der Zeitentwicklungsoperator kompakt in der folgenden Form darstellen:

$$U_S(t, t_0) = T_D \exp \left(-\frac{\mathrm{i}}{\hbar} \int_{t_0}^{t} \mathrm{d}t'\, H_{t'} \right). \qquad (3.18)$$

Einen Spezialfall stellt das abgeschlossene System dar:

$$\frac{\partial H}{\partial t} = 0 \Longrightarrow U_S(t, t_0) = \exp \left(-\frac{\mathrm{i}}{\hbar} H (t - t_0) \right). \qquad (3.19)$$

2) Heisenberg-Bild (Operatorbild)

In diesem Bild wird die Zeitabhängigkeit von den Operatoren getragen, während die Zustände zeitlich konstant bleiben.

Das in 1) diskutierte Schrödinger-Bild ist natürlich keineswegs zwingend. Jede unitäre Transformation der Operatoren und Zustände, die die Meßgrößen (Erwartungswerte, Skalarprodukte) invariant läßt, ist selbstverständlich erlaubt.

Für die Zustände im Heisenberg-Bild möge gelten:

$$\left|\psi_H(t)\right\rangle \equiv \left|\psi_H\right\rangle \stackrel{!}{=} \left|\psi_S(t_0)\right\rangle . \tag{3.20}$$

Dabei ist t_0 ein beliebiger, aber fester Zeitpunkt, z. B. $t_0 = 0$. Mit (3.7), (3.9) und (3.10) folgt:

$$\left|\psi_H\right\rangle = U_S^{-1}(t,t_0)\left|\psi_S(t)\right\rangle = U_S(t_0,t)\left|\psi_S(t)\right\rangle . \tag{3.21}$$

Wegen

$$\left|\psi_H\right\rangle A_H(t) \left\langle\psi_H\right| \stackrel{!}{=} \left|\psi_S(t)\right\rangle A_S \left\langle\psi_S(t)\right| \tag{3.22}$$

gilt dann für die Observable A im Heisenberg-Bild:

$$A_H(t) = U_S^{-1}(t,t_0) A_S U_S(t,t_0). \tag{3.23}$$

Falls H nicht explizit von der Zeit abhängt, vereinfacht sich diese Beziehung zu

$$A_H(t) = \exp\left(\frac{\mathrm{i}}{\hbar}H(t-t_0)\right) A_S \exp\left(-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}H(t-t_0)\right) \qquad \left(\frac{\partial H}{\partial t} = 0\right). \tag{3.24}$$

Insbesondere gilt dann:

$$H_H(t) = H_H = H_S = H. \tag{3.25}$$

Wir leiten schließlich noch die Bewegungsgleichung der Heisenberg-Operatoren ab:

$$\begin{aligned}
\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}A_H(t) &= \dot{U}_S^{+}(t,t_0)A_S U_S(t,t_0) + U_S^{+}(t,t_0)\frac{\partial A_S}{\partial t}U_S(t,t_0) + \\
&\quad + U_S^{+}(t,t_0)A_S\dot{U}_S(t,t_0) = \\
&= -\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}U_S^{+}HA_SU_S + \frac{1}{\mathrm{i}\hbar}U_S^{+}A_SHU_S + U_S^{+}\frac{\partial A_S}{\partial t}U_S = \\
&= \frac{\mathrm{i}}{\hbar}U_S^{+}[H,A_S]_{-}U_S + U_S^{+}\frac{\partial A_S}{\partial t}U_S .
\end{aligned}$$

Wir definieren

$$\frac{\partial A_H}{\partial t} = U_S^{-1}(t,t_0)\frac{\partial A_S}{\partial t}U_S(t,t_0) \tag{3.26}$$

und haben dann als Bewegungsgleichung:

$$\mathrm{i}\hbar \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} A_H(t) = [A_H, H_H]_-(t) + \mathrm{i}\hbar \frac{\partial A_H}{\partial t}. \tag{3.27}$$

Eine Mittelstellung zwischen Schrödinger- und Heisenberg-Bild nimmt das

3) Dirac-Bild (Wechselwirkungsbild)

ein, d. h., die Zeitabhängigkeit wird auf Zustände **und** Operatoren verteilt. Ausgangspunkt ist die übliche Situation,

$$H = H_0 + V_t, \tag{3.28}$$

in der sich der Hamilton-Operator aus einem Anteil H_0 für das *freie* System und einer eventuell explizit zeitabhängigen Wechselwirkung V_t zusammensetzt. Dann wird der folgende Ansatz vereinbart:

$$\left|\psi_D(t_0)\right\rangle = \left|\psi_S(t_0)\right\rangle = \left|\psi_H\right\rangle, \tag{3.29}$$

$$\left|\psi_D(t)\right\rangle = U_D(t,t')\left|\psi_D(t')\right\rangle, \tag{3.30}$$

$$\left|\psi_D(t)\right\rangle = U_0^{-1}(t,t_0)\left|\psi_S(t)\right\rangle. \tag{3.31}$$

Dabei soll

$$U_0(t,t') = \exp\left[-\frac{\mathrm{i}}{\hbar} H_0(t-t')\right] \tag{3.32}$$

der Zeitentwicklungsoperator des *freien* Systems sein. Daraus ergibt sich, daß bei fehlender Wechselwirkung das Dirac- mit dem Heisenberg-Bild identisch ist.

Wegen (3.29) bis (3.31) gilt die folgende Umformung:

$$\begin{aligned}\left|\psi_D(t)\right\rangle &= U_0^{-1}(t,t_0)\left|\psi_S(t)\right\rangle = U_0^{-1}(t,t_0)U_S(t,t')\left|\psi_S(t')\right\rangle = \\ &= U_0^{-1}(t,t_0)U_S(t,t')U_0(t',t_0)\left|\psi_D(t')\right\rangle \stackrel{!}{=} U_D(t,t')\left|\psi_D(t')\right\rangle.\end{aligned}$$

Wir haben damit die Verknüpfung zwischen dem Diracschen und dem Schrödingerschen Zeitentwicklungsoperator gefunden:

$$U_D(t,t') = U_0^{-1}(t,t_0)U_S(t,t')U_0(t',t_0). \tag{3.33}$$

Wir erkennen, daß für $V_t \equiv 0$, d. h. $U_S = U_0$, $U_D(t,t') \equiv 1$ wird. Dirac-Zustände sind dann zeitunabhängig. Wir fordern

$$\left\langle\psi_D(t)\right|A_D(t)\left|\psi_D(t)\right\rangle \stackrel{!}{=} \left\langle\psi_S(t)\right|A_S\left|\psi_S(t)\right\rangle$$

für einen beliebigen Operator A. Dies ergibt mit (3.31) und (3.32):

$$A_D(t) = \exp\left(\frac{\mathrm{i}}{\hbar} H_0(t - t_0\right) A_S \exp\left(-\frac{\mathrm{i}}{\hbar} H_0(t - t_0\right) . \tag{3.34}$$

Die Dynamik der Operatoren ist im Dirac-Bild also durch H_0 festgelegt. Dies erkennt man insbesondere an der Bewegungsgleichung, die sich unmittelbar aus (3.34) ableitet:

$$\mathrm{i}\hbar \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} A_D(t) = [A_D, H_0]_- + \mathrm{i}\hbar \frac{\partial A_D}{\partial t} . \tag{3.35}$$

Analog zu (3.26) haben wir dabei definiert:

$$\frac{\partial A_D}{\partial t} = U_0^{-1}(t, t_0) \frac{\partial A_S}{\partial t} U_0(t, t_0) . \tag{3.36}$$

Für die Zeitabhängigkeit der Zustände gilt nach (3.31):

$$\begin{aligned} \left| \dot{\psi}_D(t) \right\rangle &= \dot{U}_0^+(t, t_0) \left| \psi_S(t) \right\rangle + U_0^+(t, t_0) \left| \dot{\psi}_S(t) \right\rangle = \\ &= \frac{\mathrm{i}}{\hbar} \Big(U_0^+(t, t_0) H_0 - U_0^+(t, t_0) H \Big) \left| \psi_S(t) \right\rangle = \\ &= \frac{\mathrm{i}}{\hbar} U_0^+(t, t_0)(-V_t) U_0(t, t_0) \left| \psi_D(t) \right\rangle . \end{aligned}$$

Es folgt damit:

$$\mathrm{i}\hbar \left| \dot{\psi}_D(t) \right\rangle = V_t^D(t) \left| \psi_D(t) \right\rangle . \tag{3.37}$$

Die Dynamik der Zustände wird also durch die Wechselwirkung V_t festgelegt. Man unterscheide die beiden unterschiedlichen Zeitabhängigkeiten in $V_t^D(t)$! Analog zu (3.37) leitet man die Bewegungsgleichung der Dichtematrix ab:

$$\dot{\rho}_D(t) = \frac{\mathrm{i}}{\hbar} \left[\rho_D, V_t^D \right]_-(t) . \tag{3.38}$$

Setzt man (3.30) in (3.37) ein, so ergibt sich mit

$$\mathrm{i}\hbar \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} U_D(t, t') = V_t^D(t) U_D(t, t') \tag{3.39}$$

eine Bewegungsgleichung für den Zeitentwicklungsoperator, die formal-identisch mit (3.11) ist. Derselbe Gedankengang wie der im Anschluß an (3.13) führt dann auf die wichtige Beziehung:

$$U_D(t, t') = T_D \exp\left(-\frac{\mathrm{i}}{\hbar} \int_{t'}^{t} \mathrm{d}t'' \, V_{t''}^D(t'') \right) , \tag{3.40}$$

die den Ausgangspunkt für die später zu besprechende Diagrammtechnik darstellt. Man beachte, daß sich $U_D(t, t')$ im Gegensatz zu $U_S(t, t')$ auch bei fehlender expliziter Zeitabhängigkeit nicht weiter vereinfachen läßt, da dann lediglich $V_{t''}^D(t'') \to V^D(t'')$ zu ersetzen ist. Eine Zeitabhängigkeit bleibt also.

3.1.2 Linear-Response-Theorie

Wir wollen die Green-Funktionen in Verbindung mit einer ganz konkreten physikalischen Fragestellung einführen:

Wie reagiert ein physikalisches System auf eine äußere Störung?

Zuständig für diesen Problemkreis sind die sogenannten

Response-Größen,

zu denen insbesondere

- elektrische Leitfähigkeit,
- magnetische Suszeptibilität,
- Wärmeleitfähigkeit

zählen. Es stellt sich heraus, daß es sich bei diesen Größen um **retardierte Green-Funktionen** handelt. Um dies zu zeigen, führen wir mit der *Linear-Response*-Theorie ein wichtiges Lösungsverfahren der Theoretischen Physik ein.

Wir beschreiben das vorliegende System durch den Hamilton-Operator:

$$H = H_0 + V_t \; . \tag{3.41}$$

Dabei hat V_t eine etwas andere Bedeutung als in (3.28). Es beschreibt die Wechselwirkung des Systems mit einem äußeren Feld (*Störung*). H_0 betrifft das wechselwirkende Teilchensystem bei abgeschaltetem äußeren Feld. Wegen der Teilchenwechselwirkungen wird deshalb bereits das Eigenwertproblem zu H_0 nicht exakt lösbar sein.

Das skalare Feld F_t kopple an die Observable $\widehat{B}$ des Systems:

$$V_t = \widehat{B} F_t \; . \tag{3.42}$$

Man beachte, daß $\widehat{B}$ ein Operator und F_t eine c-Zahl ist. $\widehat{A}$ sei eine nicht explizit zeitabhängige Observable, deren thermodynamischer Erwartungswert $\langle \widehat{A} \rangle$ als Meßwert aufgefaßt werden kann. Es soll untersucht werden, wie $\langle \widehat{A} \rangle$ auf die *Störung* V_t reagiert.

Ohne Feld gilt

$$\langle \widehat{A} \rangle_0 = \mathrm{Sp}(\rho_0 \widehat{A}), \tag{3.43}$$

wobei ρ_0 die Dichtematrix des feldfreien Systems ist:

$$\rho_0 = \frac{\exp(-\beta \mathcal{H}_0)}{\mathrm{Sp}\big[\exp(-\beta \mathcal{H}_0)\big]} \; . \tag{3.44}$$

Gemittelt wird in der großkanonischen Gesamtheit:

$$\mathcal{H}_0 = H_0 - \mu \widehat{N}. \tag{3.45}$$

μ ist das chemische Potential. Wenn wir nun das Feld F_t einschalten, wird sich auch die Dichtematrix entsprechend ändern:

$$\rho_0 \longrightarrow \rho_t \ . \tag{3.46}$$

Dies überträgt sich auf den Erwartungswert von $\widehat{A}$:

$$\langle \widehat{A} \rangle_t = \mathrm{Sp}(\rho_t \widehat{A}). \tag{3.47}$$

Wir benutzen hier zunächst das Schrödinger-Bild, lassen den Index S aber weg. Die Bewegungsgleichung der Dichtematrix lautet nach (3.2):

$$\mathrm{i}\hbar\dot{\rho}_t = \left[\mathcal{H}_0, \rho_t\right]_- + \left[V_t, \rho_t\right]_- \ . \tag{3.48}$$

Wir nehmen an, daß das Feld zu irgendeinem Zeitpunkt eingeschaltet wird, können deshalb als Randbedingung für die Differentialgleichung erster Ordnung (3.48)

$$\lim_{t \to -\infty} \rho_t = \rho_0 \tag{3.49}$$

verwenden.

Wir wechseln nun (vorübergehend) in das Dirac-Bild, in dem mit $t_0 = 0$ nach (3.34) gilt:

$$\rho_t^D(t) = \exp\left(\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\mathcal{H}_0 t\right) \rho_t \exp\left(-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\mathcal{H}_0 t\right) . \tag{3.50}$$

Die Bewegungsgleichung (3.38) führt mit der Randbedingung (3.49),

$$\lim_{t \to -\infty} \rho_t^D(t) = \rho_0, \tag{3.51}$$

zu dem Resultat:

$$\rho_t^D(t) = \rho_0 - \frac{\mathrm{i}}{\hbar} \int\limits_{-\infty}^{t} \mathrm{d}t' \left[V_{t'}^D(t'), \rho_{t'}^D(t')\right]_- \ . \tag{3.52}$$

Diese Gleichung kann durch Iteration bis zu beliebiger Genauigkeit gelöst werden:

$$\rho_t^D(t) = \rho_0 + \sum_{n=1}^{\infty} \rho_t^{D(n)}(t), \tag{3.53}$$

$$\begin{aligned} \rho_t^{D(n)}(t) = \left(-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\right)^n \int\limits_{-\infty}^{t} \mathrm{d}t_1 \int\limits_{-\infty}^{t_1} \mathrm{d}t_2 \cdots \int\limits_{-\infty}^{t_{n-1}} \mathrm{d}t_n \ * \\ * \left[V_{t_1}^D(t_1), \left[V_{t_2}^D(t_2), \left[\dots, \left[V_{t_n}^D(t_n), \rho_0\right]_- \dots\right]_-\right]_-\right]_- \ . \end{aligned} \tag{3.54}$$

Diese Formel ist zwar exakt, aber in der Regel auch unbrauchbar, da die unendliche Reihe nicht berechenbar sein wird. Wir setzen deshalb hinreichend kleine, äußere Störungen voraus, so daß wir uns auf lineare Terme in der *Störung* V beschränken können:

Linear Response

$$\rho_t \approx \rho_0 - \frac{\mathrm{i}}{\hbar} \int\limits_{-\infty}^{t} \mathrm{d}t' \, \exp\left(-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\mathcal{H}_0 t\right) \left[V_{t'}^D(t'), \rho_0\right]_- \exp\left(\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\mathcal{H}_0 t\right). \qquad (3.55)$$

Dabei haben wir die Dichtematrix bereits wieder in die Schrödinger-Darstellung zurücktransformiert. Wir können zur Berechnung des *gestörten* Erwartungswertes diesen Ausdruck nun in (3.47) einsetzen:

$$\begin{aligned}
\langle \widehat{A} \rangle_t &= \langle \widehat{A} \rangle_0 - \frac{\mathrm{i}}{\hbar} \int\limits_{-\infty}^{t} \mathrm{d}t' \, \mathrm{Sp}\left\{\exp\left(-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\mathcal{H}_0 t\right) \left[V_{t'}^D(t'), \rho_0\right]_- \exp\left(\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\mathcal{H}_0 t\right) \widehat{A}\right\} = \\
&= \langle \widehat{A} \rangle_0 - \frac{\mathrm{i}}{\hbar} \int\limits_{-\infty}^{t} \mathrm{d}t' \, F_{t'} \, \mathrm{Sp}\left\{\left[\widehat{B}^D(t'), \rho_0\right]_- \widehat{A}^D(t)\right\} = \\
&= \langle \widehat{A} \rangle_0 - \frac{\mathrm{i}}{\hbar} \int\limits_{-\infty}^{t} \mathrm{d}t' \, F_{t'} \, \mathrm{Sp}\left\{\rho_0 \left[\widehat{A}^D(t), \widehat{B}^D(t')\right]_-\right\}.
\end{aligned}$$

Wir haben mehrmals die zyklische Invarianz der Spur ausnutzen können. Damit kennen wir die Reaktion des Systems auf die äußere Störung, wie sie von der Observablen $\widehat{A}$ vermittelt wird:

$$\Delta A_t = \langle \widehat{A} \rangle_t - \langle \widehat{A} \rangle_0 = -\frac{\mathrm{i}}{\hbar} \int\limits_{-\infty}^{t} \mathrm{d}t' \, F_{t'} \left\langle [\widehat{A}^D(t), \widehat{B}^D(t')]_- \right\rangle_0. \qquad (3.56)$$

Man beachte, daß die Reaktion des Systems durch einen Erwartungswert des ungestörten Systems bestimmt wird. Die Dirac-Darstellung der Operatoren $\widehat{A}^D(t)$, $\widehat{B}^D(t')$ entspricht der Heisenberg-Darstellung bei abgeschaltetem Feld. Wir definieren:

zweizeitige, retardierte Green-Funktion

$$G_{AB}^{\mathrm{ret}}(t,t') = \langle\langle A(t); B(t') \rangle\rangle = -\mathrm{i}\Theta(t-t') \left\langle [A(t), B(t')]_- \right\rangle_0 . \qquad (3.57)$$

Die Operatoren sind hier stets in der Heisenberg-Darstellung des feldfreien Systems gedacht. Den entsprechenden Index lassen wir weg.

Die retardierte Green-Funktion G_{AB}^{ret} beschreibt also die Reaktion des Systems, wie sie sich in der Observablen $\widehat{A}$ manifestiert, wenn die Störung an der Observablen $\widehat{B}$ angreift:

$$\Delta A_t = \frac{1}{\hbar} \int\limits_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{d}t' \, F_{t'} G_{AB}^{\mathrm{ret}}(t,t'). \qquad (3.58)$$