2.3.3. Das Wick theorem

Erwartungswerte sind durch zeitgeordnete Produkte von Operatoren bestimmt.

Es ist mgl. solche Produkte in kleinere Einheiten zu zerlegen: Wick theorem formalisiert diesen Prozeß.

(Achtg: gilt f. Operatoren im Wechselwirkungsbild:

$$b_\alpha^{(+)}(t) = b_\alpha^{(+)}(0)\, e^{\overset{(+)}{-} i \omega_\alpha t},$$

+ schwache Verallgemeinerungen die hier nicht besprochen werden)

getrennt für Bosonen u. Fermionen.

(i) Bosonen

$$\langle T \phi(t_1)\, \phi(t_2)\, \phi(t_3) \dots \phi(t_n) \rangle = ?$$

a) betrachte den Grundbaustein nach dem diese Komplexe zerlegt werden können, „$D(t_1, t_2)$" ist eine Phonon Green-Funktion.

$D(t_1, t_2) \equiv \langle T \phi(t_1) \phi(t_2) \rangle$, nach den diesen

Grundbaustein kann später alles zerlegt werden.

($\phi = (b^+ + b) g$ zur Erinnerg.)

$$D(t_1, t_2) = \theta(t_1 - t_2) \langle \phi(t_1) \phi(t_2) \rangle + \underline{\theta(t_2 - t_1) \langle \phi(t_2) \phi(t_1) \rangle}$$

$$= \theta(t_1 - t_2)\, sp_{ph}\left(\sum_{\alpha_1 \alpha_2} g_{\alpha_1} (b_{\alpha_1} + b^+_{\alpha_1}) g_{\alpha_2} (b_{\alpha_2} + b^+_{\alpha_2}) \frac{e^{-\beta H_{ph}}}{Z} \right)$$

$$+ \underline{\{ t_1 \leftrightarrow t_2 \}}$$

($b_{\alpha_1} = b_{\alpha_1}(0) e^{-i\omega_\alpha t} = b^0_{\alpha_1} e^{-i\omega_\alpha t}$

$$sp_{ph}(\cdot) = \sum_{\text{alle Mgl.}} \left\langle \begin{smallmatrix} \alpha_1 & \alpha_2 & \\ n_1 & n_2 & \dots \end{smallmatrix} \right| \cdot \left| \begin{smallmatrix} \alpha_1 & \alpha_2 & \\ n_1 & n_2 & \dots \end{smallmatrix} \right\rangle$$

Besetzungszahlzustand von bosonisch Oszillator

n_1 : Besetzungszahl des α_1-Zustands)

$$D(t_1, t_2) = \theta(t_1 - t_2) \sum_{\alpha_1 \alpha_2} g_{\alpha_1} g_{\alpha_2}\, sp_{ph}\left(\left(\underbrace{b_{\alpha_1} b^+_{\alpha_2} + b^+_{\alpha_1} b_{\alpha_2}}_{} \right) \frac{e^{-\beta H_{ph}}}{Z} \right) + \{ t_1 \leftrightarrow t_2 \}$$

stellt den Überlapp zwisch

bra und ket sicher

$$\to \delta_{\alpha_1 \alpha_2}$$

$$= \theta(t_1 - t_2) \sum_{\alpha_1} g_{\alpha_1}^2 \left((1+n_{\alpha_1}) e^{-i\omega_{\alpha_1}(t_1-t_2)} + n_{\alpha_1} e^{i\omega_{\alpha_1}(t_1-t_2)} \right) + \{ t_1 \leftrightarrow t_2 \}$$

alles bekannt: $n_\alpha \hat{=}$ Boseverteilungsfunktion (T abhängig)

$g_\alpha \hat{=}$ Kopplungsmatrix

$\omega_\alpha \hat{=}$ Bosonfrequenz

$$n_\alpha = \frac{1}{e^{\beta \hbar \omega_\alpha} - 1}, \quad \beta = \frac{1}{kT}$$

$$\boxed{D(t_1, t_2) = \sum_\alpha g_\alpha^2 \left\{ (1+n_\alpha) e^{-i\omega_\alpha |t_1 - t_2|} + n_\alpha e^{+i\omega_\alpha |t_1 - t_2|} \right\}}$$

Phonon-Greensfunktion als Baustein f. Wicktheorem

b) Wie kann man $\langle T \phi(t_1) \phi(t_2) \phi(t_3) \phi(t_4) \rangle$ nach dem Grundbaustein $D(t_1, t_2)$ zerlegen?

dazu sehen wir uns: $\langle T \, b^+_{\alpha_1} \phi_2 \phi_3 \phi_4 \rangle$ an,

wenn auch $\langle T \, b_{\alpha_1} \phi_2 \phi_3 \phi_4 \rangle$ bekannt, dann folgt $\langle T \phi_1 \phi_2 \phi_3 \phi_4 \rangle$ ohne Probleme.

$$\langle T\, b_{\alpha_1}^{(+)} \phi_2 \phi_3 \phi_4 \rangle =$$

$$\langle T\, \underline{b_{\alpha_1}^{(+)} \phi_2}\, \phi_3 \phi_4 \rangle - \langle T\, \underline{\phi_2\, b_{\alpha_1}^{(+)}}\, \phi_3\, \phi_4 \rangle$$

$$+ \langle T\, \phi_2\, \underline{b_{\alpha_1}^{(+)} \phi_3}\, \phi_4 \rangle - \langle T\, \phi_2\, \underline{\phi_3\, b_{\alpha_1}^{(+)}}\, \phi_4 \rangle$$

$$+ \langle T\, \phi_2\, \phi_3\, \underline{b_{\alpha_1}^{(+)} \phi_4} \rangle - \langle T\, \phi_2 \phi_3\, \underline{\phi_4\, b_{\alpha_1}^{(+)}} \rangle$$

$$+ \langle T\, \phi_2\, \phi_3\, \phi_4\, b_{\alpha}^{(+)} \rangle =$$

$\longrightarrow$ $\hat{=}$ Kommutator $\hat{=}$ Zahl $\Rightarrow$ Reduktion der Schwierigkeit

$$= \langle T \phi_3\, \phi_4 \rangle [\, b_{\alpha_1}^{(+)}, \phi_2] + \langle T \phi_2\, \phi_4 \rangle [b_{\alpha_1}^{(+)}, \phi_3]$$

$$+ \langle T\, \phi_2\, \phi_3 \rangle [\, b_{\alpha_1}^{(+)}, \phi_4] + Sp_{ph} \left(T \phi_2 \phi_3 \phi_4\, b_{\alpha_1}^{(+)} \rho_{ph} \right)$$

nutzen: $b_{\alpha}^{(+)} \rho_{ph} = \rho_{ph}\, b_{\alpha}^{(+)}\, e^{\overset{(+)}{-} \varepsilon_\alpha \beta}$

$\varepsilon_\alpha = \hbar \omega_\alpha$

und zyklisch vertauschen →

$$\langle T\, b^{+}_{\alpha_1}\, \phi_2\, \phi_3\, \phi_4 \rangle = \frac{-1}{(e^{+\beta\varepsilon_\alpha}-1)} \left\{ D(t_3, t_4)\, T[b^{+}_{\alpha_1}, \phi_2] \ldots \right.$$

$$\langle T\, b_{\alpha}\, \phi_2\, \phi_3\, \phi_4 \rangle = \frac{-1}{(e^{-\beta\varepsilon_\alpha}-1)} \left\{ D(t_3, t_4)\, T[b_{\alpha_1}, \phi_2] \ldots \right.$$

Summe bilden

$$\langle T\, \phi_1\, \phi_2\, \phi_3\, \phi_4 \rangle = D(t_3, t_4)\, D(t_1, t_2) +$$

alle andern Kombinationen

$$[b^{(+)}_{\alpha_1}, \phi_2] = \Big(b_{\alpha_1} \sum_{\alpha_2} g_{\alpha_2} (b^{+}_{\alpha_2} + b_{\alpha_2}) -$$

$$\sum_{\alpha_2} g_{\alpha_2} (b^{+}_{\alpha_2} + b_{\alpha_2})\, b_{\alpha_1} \Big)$$

$$= \Big|\ \hat{=}\ \text{Kommutator } [b_{\alpha_1}, b^{+}_{\alpha_2}] = \delta_{\alpha_1\alpha_2}\, e^{-i\omega_{\alpha_1}(t_1-t_2)} \Big|$$

$$= (-)\, e^{\overset{(+)}{-} i\omega_\alpha (t_1 - t_2)}$$

1. Wick theorem: Zeitgeordnete Produkte von Operatoren im WW-Bild werden in alle mögl. Permutationen von je 2 Operatoren zerlegt:

$$\langle T \phi_1 \phi_2 \phi_3 \phi_4 \dots \rangle = \langle T \phi_1 \phi_2 \rangle \langle T \phi_3 \phi_4 \rangle \dots$$

$$+ \langle T \phi_1 \phi_3 \rangle \langle T \phi_2 \phi_4 \rangle \dots$$

$$= \sum_{\substack{\text{alle mögl.} \\ \text{Zweier}}} \prod_{a,b} \underbrace{\langle T \phi_a \phi_b \rangle}_{D(t_a, t_b)}$$

(ii) Fermionen

$$\langle T a_1^+ a_2 a_3 a_4 a_5^+ a_6 \dots \rangle = ?$$

$$a_{n_1}^+ (t_1) \equiv a_1^+$$

„a" seien Fermionen.

2. Wick theorem

Zeitgeordnete Operatoren im WW-Bild werden in alle Kombination von 2 Operatoren zerlegt:

$$\langle T a_1^+ a_2 a_3^+ a_4 \dots \rangle = \langle T a_1^+ a_2 \rangle \langle T a_3^+ a_4 \rangle \dots$$
$$- \langle T a_1^+ a_3^+ \rangle \langle T a_2 a_4 \rangle \dots$$
$$+ \langle T a_1^+ a_4 \rangle \langle T a_2 a_3^+ \rangle \dots$$
$$\dots$$

Es sind alternierende Vorzeichen zu nehmen, für „a“ = Boson nicht.

$$\langle T a_1^+ a_2 \rangle = G(t_1, t_2) = \delta_{12}\, n_1\, e^{i\varepsilon_1 (t_1 - t_2)}$$

„Elektron-Greenfunktion“ Fermifunktion

Bsp: Band $k_1 = 1$

$$= \delta_{k_1 k_2}\, n_{k_1}\, e^{i\varepsilon_{k_1}(t_1 - t_2)}$$

Fermifunktion $n_{k_1} = \dfrac{1}{e^{\beta(\varepsilon_{k_1} - \mu)} + 1}$

$$\underbrace{\langle T\, a_1\, a_2^+ \rangle}_{G^+(t_1,t_2)} = \delta_{12}\,(1-n_1)\,e^{-i\varepsilon_1 (t_1-t_2)}$$

3. Wicktheorem. Die zeitgeordnete EW verschiedener Operatoren faktorisieren:

$$\langle T\, a_1^+ a_2\, \phi_1 \phi_2 \rangle = \langle T\, a_1^+ a_2 \rangle \langle T\, \phi_1 \phi_2 \rangle$$

2.3.4. Lösung d. Modells unabhängiger Bosonen

hatte Dipoldichte eines Zweiniveausystems abgeleitet:

$$P(t) = P(0)\,e^{i\omega_{21} t}\, Sp_{ph}\left(\sum_{n=0}^{\infty} \frac{i^n}{n!} \int_0^t dt_1 \cdots \int_0^t dt_n\, T\, \phi_1 \cdots \phi_n\, \rho_{ph}\right)$$

Dipoldichte

Anfangswert

freie Schwingg.

Modifikation d. Phononen

suchen:

$$\underline{Sp_{ph}}\left(\sum_{n=0}^{\infty} \frac{i^{2n}}{(2n)!} \underline{\int_0^t dt_1 \cdots \int_0^t dt_{2n}\, T\, \phi_1 \cdots \phi_{2n}\, \rho_{ph}}\right)$$

ungerade Beiträge

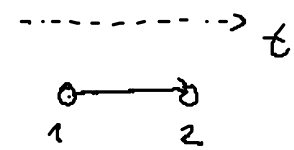
verschwinden

$$n \to 2n$$

<u>$n = 0$</u> $\longrightarrow$ 1

<u>$n = 1$</u> $\longrightarrow$ $\dfrac{(-1)^1}{2!} \underbrace{\langle T\, \phi(t_1)\, \phi(t_2) \rangle}$

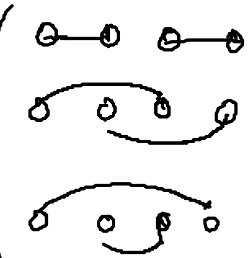
$$= \Big(\underbrace{-1 \; \frac{1}{2!}}_{} \Big)$$



„GB“ „Grundbausteine“ — „EW „Kontraktion“

<u>$n = 2$</u> $\longrightarrow$ $\dfrac{(-1)^2}{4!} \langle T\, \phi_1\, \phi_2\, \phi_3\, \phi_4 \rangle =$

$$\frac{(-1)^2}{4!} \langle T \;\circ\;\circ\;\circ\;\circ\; \rangle = \frac{(-1)^2}{4!} \Big(\quad \Big)$$

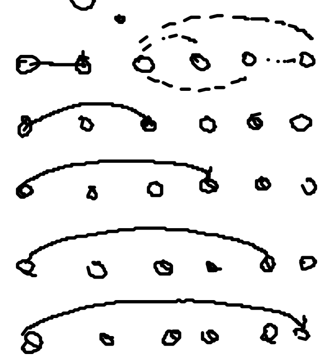


alle Mgl !

$$= \frac{1}{4!} \begin{pmatrix} \circ\!\!-\!\!\circ^{\,2} \\ \circ\!\!-\!\!\circ^{\,2} \\ \circ\!\!-\!\!\circ^{\,2} \end{pmatrix} = \frac{3}{4!} \left(\circ\!\!-\!\!\circ \right)^2 = \frac{1}{2!} \Big(\underbrace{-1 \frac{1}{2}\, \circ\!\!-\!\!\circ}_{\text{GB}} \Big)^2$$

$$\int dt_1 \int t_2 \cdots \int dt_{2n} \quad \langle 1,2 \rangle \langle 3,4 \rangle$$

$\underline{n=3}$ $\longrightarrow$ $$(-1)^3 \frac{1}{6!} \langle T \phi_1 \phi_2 \phi_3 \phi_4 \phi_5 \phi_6 \rangle =$$

$$(-1)^3 \frac{1}{6!} \Bigg($$  $$\Bigg) = \frac{(-1)^3}{3!} \frac{15}{4 \cdot 5 \cdot 6} (\circ\!-\!\circ)^3$$

$$\underbrace{(6-1)(6-3)\underset{=1}{(6-5)}}$$

$$= 5 \cdot 3 \cdot 1 = 15$$

$$= \frac{(-1)^3}{3!} \frac{1}{8} (\circ\!-\!\circ)^3 = \frac{(GB)^3}{3!}$$

$\underline{n = \text{beliebig}}$ $$(-1)^n \frac{1}{(2n!)} \langle T \phi_1 \cdots \phi_{2n} \rangle$$

$$= (-1)^n \frac{1}{(2n!)} \underbrace{(\circ\!-\!\circ)^n}_{\text{wie viele?}}$$

$$(2n-1)(2n-3) \cdots 1$$

2er Schritte nach unten

$$= (-1)^n \frac{1}{(2n!)} (\circ\!-\!\circ)^n \underbrace{(2n-1)(2n-3)\cdots 3\cdot 1}_{\frac{(2n)!}{n!\, 2^n}}$$

(Mathebuch!)

$$= \frac{1}{n!}\left(-\frac{1}{2}\, \circ\!-\!\circ\right)^n - \frac{1}{n!}(GB)^n$$

$P(t)$ ist eine Exponentialreihe: $e^x = \sum_n \frac{1}{n!} x^n$ ↖ GB

$$\rightarrow P(t) = P(0) \underbrace{e^{i\omega_{12} t}}_{\text{freie Oszillation}} e^{-\frac{1}{2}\int_0^t dt_1 \int_0^t dt_2 \langle T\phi(t_1)\phi(t_2)\rangle}$$

$$D(t_1, t_2) = \langle T\phi(t_1)\phi(t_2)\rangle$$

bestimmt die Lösung

Berechnung von $-\frac{1}{2}\int_0^t dt_1 \int_0^t dt_2 \quad \langle T \phi(t_1)\, \phi(t_2) \rangle$

$$= -\frac{1}{2} \int_0^t dt_1 \int_0^t dt_2 \; \underset{\substack{\uparrow \\ \text{bekannt (berechnet zu Beginn VL)}}}{D(t_1, t_2)} = -\frac{1}{2} \int_0^t dt_1 \int_0^t dt_2 \sum_\alpha g_\alpha^2 \left\{ (1+n_\alpha) e^{-i\omega_\alpha |t_1 - t_2|} + n_\alpha e^{i\omega_\alpha |t_1 - t_2|} \right\}$$

Doppelintegral über Exp.-Funktion kann berechnet werden

($s = t_1 - t_2$ einführen ...).

$$= -\sum_\alpha \frac{g_\alpha^2}{\omega_\alpha} \left\{ (1+n_\alpha)\left(1 - e^{-i\omega_\alpha t}\right) + n_\alpha \left(1 - e^{i\omega_\alpha t}\right) \right\}$$

$$+ \, i \sum_\alpha \frac{g_\alpha^2}{\omega_\alpha} \, t$$

steht in Exp. der Dipoldichte!

→ temperaturabhängig über $n_\alpha(T)$

→ Vielfachphononprozesse über Exp-Funktion

→ Sehr komplexes Verhalten, abhängig v. Phononmoden