2.3.3. Das Wicktheorem

Erwartungswerte sind durch zeitgeordnete Produkte von Operatoren bestimmt.

Es ist mgl. solche Produkte in kleinere Einheiten zu zerlegen: Wicktheorem 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

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

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 Erinnerung.)

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

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

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

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

$$sp_{ph}(\cdot) = \sum_{\text{alle Mögl.}} \left\langle {\alpha_1 \atop n_1}\ {\alpha_2 \atop n_2} \cdots \right| \cdot \left| {\alpha_1 \atop n_1}\ {\alpha_2 \atop n_2} \cdots \right\rangle$$

Besetzungszahlzustand von bosonisch Oszillator

n_1 : Besetzungszahl des α_1-Zustands)

$$D(t_1,t_2) = \theta(t_1-t_2) \sum_{\alpha_1 \alpha_2} g_{\alpha_1} g_{\alpha_2}\, sp_{ph}\Big(\underbrace{(b_{\alpha_1} b^+_{\alpha_2} + b^+_{\alpha_1} b_{\alpha_2})}_{\text{stellt den Überlapp zwischen bra und ket sicher}} \frac{e^{-\beta H_{ph}}}{Z} \Big) + \{t_1 \leftrightarrow t_2\}$$

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

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

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 den 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: $b_{\alpha}^{(+)} \rho_{ph} = \rho_{ph} b_{\alpha}^{(+)} e^{\overset{(+)}{-} \varepsilon_\alpha \beta}$ $\qquad \varepsilon_\alpha = \hbar \omega_\alpha$

und zyklisch vertauschen $\longrightarrow$

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

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

Summe bilden

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

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

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

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

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

(ii) Fermionen

$$\langle T a_1^\dagger a_2 a_3 a_4 a_5^\dagger a_6 \ldots \rangle = ?$$

$$a_{u_1}^\dagger (t_1) \equiv a_1^\dagger$$

„a" seien Fermionen.

2. Wicktheorem

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

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

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 $k_1 = 1$

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

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

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

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:

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

Dipoldichte; Anfangswert; freie Schwingg.; Modifikation d. Phononen

suchen:

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

ungerade Beiträge

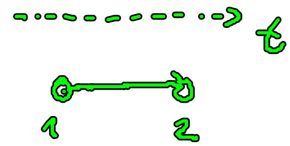
verschwinden

$$u \to 2u$$

$$\underline{u=0} \quad \to \quad 1$$

$$\underline{u=1} \quad \to \quad \frac{(-1)^1}{2!} \underbrace{\langle T \phi(t_1)\phi(t_2)\rangle}$$

$$= \underbrace{\left(-1 \, \frac{1}{2!} \right.}_{\text{"GB"}} \quad t$$



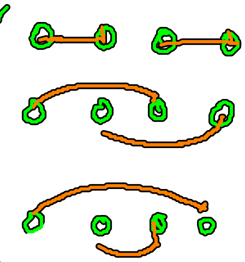
$$\left. \right)$$

"Grundbausteine"

" —— " EW "Kontraktion"

$$\underline{u=2} \quad \to \quad \frac{(-1)^2}{4!} \langle T \phi_1 \phi_2 \phi_3 \phi_4 \rangle =$$

$$\frac{(-1)^2}{4!} \langle T \circ \circ \circ \circ \rangle = \frac{(-1)^2}{4!} \left(\right.$$



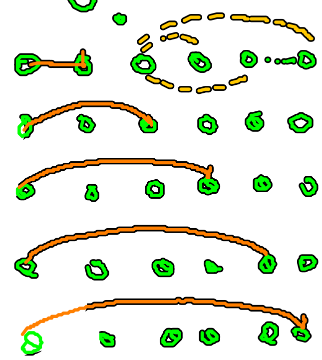
$$\left. \right)$$

alle Mgl!

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

$$= -\frac{1}{2}\int_0^t dt_1 \int_0^t dt_2 \; D(t_1,t_2) = -\frac{1}{2}\int_0^t dt_1 \int_0^t dt_2 \sum_\alpha g_\alpha^2 \left\{ (1+n_\alpha) e^{-i\omega_\alpha |t_1-t_2|} + n_\alpha e^{i\omega_\alpha |t_1-t_2|} \right\}$$

bekannt (berechnet zu Beginn VL)

Doppelintegral über Exp.-Funktion kann berechnet werden ($s = t_1 - t_2$ einführen …).

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

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

steht in Exp. der Dipoldichte!

→ temperaturabhängig über $n_\alpha(T)$

→ Vielfachphononprozesse über Exp-Funktion

→ Sehr komplexes Verhalten, abhängig v. Phononmode