VI Theorie der Zeitentwicklung von Operatoren

1. Einführung

a) Ankopplung eines externen Felds ohne Vielteilcheneffekte

$H = H_S + W_{ext}(t)$: Einteilchen Hamiltonians ($\sim a_k^+ a_{k'}$)

i.a. als bekannt vorausgesetzt: $H_S^{(a)} |k\rangle = \varepsilon_k |k\rangle$

Bewegungsgleichg. f. Observable $O(t)$ aus Heisenberg / oder

von Neumanngleichung $\Longrightarrow$ geschlossene Gleichungen $\rightarrow$ lösbar ✓

Beispiele: Blochgleichungen, Dichtematrixgleichungen

b) mit Vielteilcheneffekten

$$H = H_0 + H_W + W_{ext}(t) \quad \begin{array}{l} \nearrow H_0 + H_W^{approx} + W_{ext}(t) \\ \searrow \underbrace{H_0 + W_{ext}(t)}_{H_S(t)} + \underbrace{H_W}_{\equiv V \;:\; \text{Störung}} \end{array}$$

H_W: Vielteilcheneffekte

bekannt: $H_0 |k\rangle = \varepsilon_k |k\rangle$

Störungstheorie:

$$\langle O \rangle = \langle \Psi_I(t) | O_I(t) | \Psi_I(t) \rangle \overset{\text{alternativ}}{=} sp\left(O_I(t) \rho_I(t) \right)$$

$$\dot{O}_I(t) = i\hbar^{-1} [H_S(t), O_I(t)] \quad \text{— lösbar}$$

$$|\dot{\Psi}_I(t)\rangle = -i\hbar^{-1} V_I(t) |\Psi_I(t)\rangle \quad \leftarrow \text{einsetzen}$$

alternativ
$$\underbrace{\dot{\rho}_I(t) = -i\hbar^{-1} [V_I(t), \rho_I(t)]}$$

$V_I = V_I(O_I)$

Störungstheorie zu lösen

(ψ_I , ρ_I)

allgemeine Form der Gleichungen für Störungstheorie:

$$\dot{p}(t) = -i\,\phi(t)\,p(t) \quad \hat{=}\ \psi_I\text{-Gleichg.}$$

$$\text{mit}\quad \phi(t)\cdot = \frac{1}{\hbar}[V_I, \cdot\,] \quad \hat{=}\ \rho_I\text{-Gleichg.}$$

2. von Neumann Reihe

Ziel unglt. viele Ordnung Störungstheorie!

aus $\dot{p}(t) = -i\phi(t)\,p(t)$ $\qquad$ ϕ, p sind Operatoren

für Zahlen: $\quad p(t) = p(t_0)\, e^{-i\int_{t_0}^{t} dt'\,\phi(t')}$ $\quad\rightarrow$ wie für Operatoren!

für Operatoren: $\quad p(t) - p(t_0) = -i\int_{t_0}^{t} dt_1\,\phi(t_1)\,p(t_1)$

durch formale Integration

$$\underbrace{p(t) = p(t_0) - i\int^{t} dt_1\,\phi(t_1)\,p(t_1)}_{\text{immer wieder einsetzen, Iteration}}$$

$$p(t) = p(t_0) - i\int_{t_0}^{t} dt_1\,\phi(t_1)\,p(t_0) + (-i)^2\int_{t_0}^{t} dt_1\,\phi(t_1)\int_{t_0}^{t_1} dt_2\,\phi(t_2)\,p(t_2)$$

immer wiederholen der Iteration

$$p(t) = \left(1 + \sum_{n=1}^{\infty}(-i)^n \int_{t_0}^{t} dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 \int_{t_0}^{t_2} dt_3 \cdots \int_{t_0}^{t_{i-1}} dt_i \cdots \int_{t_0}^{t_{n-1}} dt_n\, \phi(t_1)\cdots\phi(t_i)\cdots\phi(t_n)\right)\cdot p(t_0)$$

$t \longleftarrow t_n$

Zeitordnung

wie würde man obige exp.-Fkt. bekommen:

a) Vorfaktor $\frac{1}{n!}$ b) überall obere Grenze t

Problem: $[\phi(t_i), \phi(t_j)]_- \neq 0$, $\exists$ i.a. nur zeitgleiche Vertauschungsrelationen.

(i) wenn ϕ eine Zahl wäre: wie bekommt man exp.-Fkt von oben:

0. Term: $\underline{\underline{1}} \cdot p(t_0)$

1. Term: $-i\int_{t_0}^{t} dt'\, \phi(t')$ 1. Term der Exp. Fkt.

2. Term: $(-i)^2 \int_{t_0}^{t} dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2\, \phi(t_1)\phi(t_2) = (-i)^2 \int^{t} dt_1 \int^{t} dt_2\, \Theta(t_1-t_2)\phi(t_1)\phi(t_2)$

$$\overset{z}{=} \frac{(-i)^2}{2!}\left\{\int^{t} dt_1 \int^{t} dt_2\, \Theta(t_1-t_2)\underline{\phi(t_1)\phi(t_2)} + \int^{t} dt_2 \int^{t} dt_1\, \Theta(t_2-t_1)\phi(t_2)\phi(t_1)\right.$$

derselbe Term $t_1 \leftrightarrow t_2$

Zahlen $\phi(t_1)\phi(t_2)$

$$= \frac{(-i)^2}{2!}\left\{\left[\int^{t} dt_1 \int^{t} dt_2\, \Theta(t_1-t_2) + \int^{t} dt_2 \int^{t} dt_1\, \Theta(t_2-t_1)\right]\phi(t_1)\phi(t_2)\right.$$

$$= \frac{(-i)^2}{2!} \left\{ \int^t dt_1 \int^t dt_2 \underbrace{\left(\theta(t_1 - t_2) + \theta(t_2 - t_1)\right)}_{1} \right. \phi(t_1)\phi(t_2)$$

$$= \frac{(-i)^2}{2!} \int^t dt_1 \phi(t_1) \int^t dt_2 \phi(t_2) = \frac{\left(-i \int^t dt_1 \phi(t_1)\right)^2}{2!}$$

3. Term $\int^t dt_1 \int^{t_1} dt_2 \int^{t_2} dt_3 \rightarrow \int^t dt_1 \int^t dt_2\, \theta(t_1 - t_2) \int^t dt_3\, \theta(t_2 - t_3)$

an $\phi(t_1)\phi(t_2)\phi(t_3)$ $\exists$ 3! Mgl. das Integral umzuschreiben

$$\frac{1}{3!} \int^t dt_1 \int^t dt_2 \int^t dt_3 \underbrace{\sum_{\pi_{1,2,3}} \theta(t_1 - t_2)\theta(t_2 - t_3)}_{1} \phi(t_1)\phi(t_2)\phi(t_3)$$

$\Downarrow$ $p(t) = e^{-i \int^t dt' \phi(t')} p(t_0)$ <u>Zahl!</u>

wenn man alle Ordng. aufsummiert

<u>(ii) wenn p und ϕ Operatoren sind, vorsichtigere Formulierung:</u>

$\phi(t_1) \dots \phi(t_n)$ <u>muß</u> die Zeitordng. behalten

oder die Wiederherstellg. muß sicher gestellt werden n-ter Term:

$$\int^t dt_1 \int^t dt_2\, \Theta(t_1-t_2) \cdots \int^t dt_i\, \Theta(t_{i-1}-t_i) \cdots \int^t dt_n\, \Theta(t_{n-1}-t_n)\ \phi(t_1)\cdots\phi(t_i)\cdots\phi(t_n)$$

$$= \underbrace{\int^t dt_1 \cdots \int dt_n\ \Theta(t_1-t_2)\cdots\Theta(t_{i-1}-t_i)\cdots\Theta(t_{n-1}-t_n)}_{\text{alle Permutation von } \{t_i\} \text{ bilden und summieren}}\ \phi(t_1)\cdots\phi(t_i)\cdots\phi(t_n)$$

$$= \frac{1}{n!} \int dt_1 \cdots \int dt_i \cdots \int dt_n\ \underbrace{\sum_{\Pi_{\{t_i\}}} \Theta(t_1-t_2)\cdots\Theta(t_{n-1}-t_n)}_{\text{wenn man dies zu 1 zusammenfassen würde}}\ \underbrace{\phi(t_1)\cdots\phi(t_i)\cdots\phi(t_n)}_{\Longrightarrow \text{ falsche Zeitordnung.}}$$

Korrekturfaktor

<u>Idee</u>: nicht „1" setzen sondern Zeitordnungsoperator T nennen

$$= \frac{1}{n!} \int^t dt_1 \cdots \int^t dt_i \cdots \int^t dt_n\ T\ \phi(t_1)\cdots\phi(t_i)\cdots\phi(t_n)$$

<u>Beispiel</u>: 2 Term $T\,\phi(t_1)\,\phi(t_2) =$

$$\left[\Theta(t_1-t_2) + \Theta(t_2-t_1)\right]\ \phi(t_1)\,\phi(t_2)$$

$$= \begin{cases} \phi(t_1)\,\phi(t_2) & \text{für } t_1 > t_2 \\ \phi(t_2)\,\phi(t_1) & \text{für } t_2 > t_1 \end{cases}$$

3. Term: $T\,\phi(t_1)\,\phi(t_2)\,\phi(t_3) = 3!$ Terme

formale Lösung:

$$\rho(t) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-i)^n}{n!} \int^t dt_1 \cdots \int^t dt_n \; T \, \phi(t_1) \cdots \phi(t_n) \, \rho(t_0)$$

$$= T \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-i)^n}{n!} \left(\int^t dt' \, \phi(t') \right)^n \rho(t_0)$$

$$= \underbrace{T \, e^{-i \int_{t_0}^{t} dt' \, \phi(t')}}_{\text{zeitgeordnete Exp.-Fkt.}} \rho(t_0)$$

Unter dem T kann man Funktionen von Operatoren wie Zahlen manipulieren z.B.: $e^{\phi_1+\phi_2} = e^{\phi_1} e^{\phi_2}$

und später zeitordnen. Beispiele später

Problem ist jetzt auf zeitgeordnete Produkte zurückgeführt

$$\langle T \, \phi(t_1) \cdots \phi(t_i) \cdots \phi(t_n) \rangle$$

Wicktheorem sagt uns wie man damit umgeht und deren Komplexität verringert.

3. Wicktheorem f. Bosonen

$$\phi(t) = \sum_\alpha g_\alpha \left(b_\alpha(t) + b_\alpha^+(t) \right)$$ i.a. siehe H. El-Phonon WW

$$\langle T\,\phi(t_1)\cdots\phi(t_n)\rangle = sp_{phonon}\left(T\,\phi(t_1)\cdots\phi(t_n)\,\rho_{ph}\right)$$

Störungstheorie war im WW Bild:

Phonon trägt H_0 – Zeitabhängigkeit $b_\alpha^{(+)}(t) = b_\alpha^{(+)}\, e^{(+)i\omega_\alpha t}$

ρ_{ph} ist der statistische Operator am Beginn des Prozesses, i.a. $e^{-\frac{H_{ph}^0}{kT}}$

<u>Idee:</u> jeder Term der Reihe kann über Produkte eines Grundbausteins ausgedrückt werden.

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

„Phonon Greenfunktion, Propagator"

$$= \Theta(t_1-t_2)\,\langle\phi(t_1)\,\phi(t_2)\rangle + \Theta(t_2-t_1)\,\langle\phi(t_2)\,\phi(t_1)\rangle$$

$$= \Theta(t_1-t_2)\; sp_{ph}\left(\sum_{\alpha_1\alpha_2} g_{\alpha_1} g_{\alpha_2}\left(b_{\alpha_1}(t_1)+b_{\alpha_1}^+(t_1)\right)\left(b_{\alpha_2}(t_2)+b_{\alpha_2}^+(t_2)\right)\frac{e^{-\beta H_{ph}^0}}{Z}\right)$$

Zustandssumme

$sp \mathrel{\hat{=}} \sum_n \langle n|\ \cdot\ |n\rangle$ über vollständiges System:

$$|n\rangle = \left| \begin{matrix} \beta_1 & \beta_2 & \dots \\ n_{\beta_1} & n_{\beta_2} & \end{matrix} \right\rangle$$ von Besetzungszahlzuständen: $\exists$ nur Paare v. Erzeuger / Vernichter tragen bei

$$= \theta(t_1 - t_2) \sum_{\alpha_1 \alpha_2} g_{\alpha_1} g_{\alpha_2} \, \mathrm{sp}\left(\left(b_{\alpha_1}(t_1) \, b^+_{\alpha_2}(t_2) + b^+_{\alpha_1}(t_1) \, b_{\alpha_2}(t_2) \right) \frac{e^{-\beta H^0_{ph}}}{Z} \right)$$

$\alpha_1 = \alpha_2$ sonst kein Überlapp bei spur

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

n_α: Phononzahl : Boseverteilg.

$+ \; (t_1 \Leftrightarrow t_2) \; \rightarrow$ 2. Thetafunktion darf nicht vergessen werden

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

b) Wie kann man $\langle T \, \phi(t_1) \, \phi(t_2) \, \phi(t_3) \, \phi(t_4) \rangle$

nach $D(t_i, t_j)$ zerlegen

$$\phi(t_1) \rightarrow \phi_1$$

ansehen:

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

$$\langle T \, b^{(+)}_{\alpha_1} \, \phi_2 \, \phi_3 \, \phi_4 \rangle - \underbrace{\langle T \, \phi_2 \, b^{(+)}_{\alpha_1} \, \phi_3 \, \phi_4 \rangle}_{\cdots = 0}$$

$$+ \langle T \, \phi_2 \, b^{(+)}_{\alpha_1} \, \phi_3 \, \phi_4 \rangle - \underbrace{\langle T \, \phi_2 \, \phi_3 \, b^{(+)}_{\alpha_1} \, \phi_4 \rangle}_{\cdots = 0}$$

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

$$\cdots = 0$$

$$+ \langle T \phi_2 \phi_3 \phi_4 b^+_{\alpha_1} \rangle$$

$$= \langle T \phi_3 \phi_4 \rangle \underbrace{[b^+_{\alpha_1}, \phi_2]_-}_{\text{Kein Operatorcharakter}} + \langle T \phi_2 \phi_4 \rangle [b^{(+)}_{\alpha_1}, \phi_3]_-$$

$$+ \langle T \phi_2 \phi_3 \rangle [b^{(+)}_{\alpha_1}, \phi_4] + \overbrace{sp_{ph} (T \phi_2 \phi_3 \phi_4 b^{(+)}_{\alpha_1} \rho^0_{ph})}^{*}$$

Idee: und links bringen um linke Seite zu haben

$$\text{dazu} \quad b^{(+)}_\alpha \rho^0_{ph} = \rho^0_{ph} b^{(+)}_\alpha e^{\pm \varepsilon_\alpha \beta}$$

Phononenergie

$$* = sp_{ph} (T \phi_2 \phi_3 \phi_4 \rho^0_{ph} b^{(+)}_{\alpha_1}) e^{\pm \varepsilon_\alpha \beta}$$

zyklische Vertauschung

Term auf linke Seite bringen (differentialgl.)

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

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

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

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

$$= \begin{matrix}(-)\\(+)\end{matrix} g_{\alpha_1} e^{-i\omega_{\alpha_1}(t_1 - t_2)}$$

mit $u_\alpha = \frac{1}{e^{\beta \varepsilon_\alpha} - 1}$, $-1 - u_\alpha = \frac{1}{e^{-\beta\varepsilon_\alpha} - 1}$

zusammenfassend:

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

1. Wicktheorem:

Zeitgeordnete Produkte v. Boseoperatoren ϕ im WW-Bild werden in alle mgl. Permutation von je 2 Operatoren zerlegt:

$$\langle T \phi_1 \phi_2 \dots \rangle = \sum_{\pi} \prod_{(a,b)} \langle T \phi_a \phi_b \rangle$$