DAS ZEITGEORDNETE PRODUKT

In der Vorlesung wurde $U(t,t_0)$, der Zeitentwicklungsoperator (*time evolution operator*) eingeführt. Da bekanntlich der Hamilton-Operator H der Generator der Translationen in der Zeit ist, erwarten wir, dass $U(t,t_0)$ durch H ausgedrückt werden kann. In der Tat ist der Zeitenticklungsoperator durch die Anfangsbedingung $U(t_0,t_0) = 1\!\!1$ und die Schrödinger-Gleichung

$$\mathrm{i}\hbar\partial_t U(t,t_0) = HU(t,t_0)$$

eindeutig bestimmt. Die Lösung dieser Gleichung hängt allerdings von der Art der Zeitabhängigkeit des Hamilton-Operators H ab. Im folgenden legen wir uns nicht auf ein bestimmtes Bild (Schrödinger-, Heisenberg- oder Wechselwirkungs-Bild) fest.

$H \neq H(t)$. Im einfachsten Falle ist H nicht explizit von der Zeit abhängig. Dann erhalten wir das einfache Ergebnis

$$U(t,t_0) = \exp\left(-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}(t-t_0)H\right), \quad H \neq H(t)\,.$$

Dies ist ganz analog zum Zusammenhang der Lie-Gruppe der endlichen Transformationen (z.B. Drehungen) zur Lie-Algebra der infinitesimalen Transformationen, der bekanntlich durch die Exponentialabbildung vermittelt wird.

$[H(t), H(t')] = 0$. Der nächst kompliziertere Fall liegt vor, wenn H zwar explizit von der Zeit abhängt, aber so, dass die Hamilton-Operatoren zu verschiedenen Zeiten miteinander kommutieren (z.B. ein homogenes Magnetfeld mit zeitlich veränderlicher Amplitude aber konstanter Ausrichtung entlang der z-Achse). Es ergibt sich als Lösung

$$U(t,t_0) = \exp\left(-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\int_{t_0}^{t}\mathrm{d}t' H(t')\right), \quad [H(t'),H(t'')] = 0\,.$$

Dies ist die offensichtliche Verallgemeinerung des zeitunabhängigen Falles. Man sollte sich aber klar machen, dass diese Gleichung die Taylor-Entwicklung

$$U(t,t_0) = 1\!\!1 + \sum_{n=1}^{\infty}\frac{1}{n!}\left(\frac{-\mathrm{i}}{\hbar}\int_{t_0}^{t}\mathrm{d}t' H(t')\right)^n = 1\!\!1 + \frac{-\mathrm{i}}{\hbar}\int_{t_0}^{t}\mathrm{d}t' H(t') + \left(\frac{-\mathrm{i}}{\hbar}\right)^2\int_{t_0}^{t}\mathrm{d}t' H(t')\int_{t_0}^{t}\mathrm{d}t'' H(t'') + \ldots$$

besitzt. Dabei treten Mehrfachintegrale auf, die jedoch faktorisieren, da die Hamilton-Operatoren zu verschiedenen Zeiten kommutieren.

Der physikalisch interessantere und realistischere Fall liegt jedoch vor, wenn die Hamilton-Operatoren zu verschiedenen Zeiten nicht miteinander vertauschen (z.B. ein homogenes Magnetfeld mit zeitlich veränderlicher Amplitude und zeitlich variabler Ausrichtung), d.h. $[H(t'),H(t'')] \neq 0$ für $t' \neq t''$.

Dyson Reihe. Wir wollen den Zeitentwicklungsoperator für den allgemeinen Fall konstruieren. Die obige Differentialgleichung ist formal äquivalent zu der Integralgleichung

$$U(t,t_0) = 1\!\!1 - \frac{\mathrm{i}}{\hbar}\int_{t_0}^{t}\mathrm{d}t' H(t')U(t',t_0)\,,$$

wobei hier die Anfangsbedingung bereits berücksichtigt wurde. Setzt man die rechte Seite dieser Gleichung für $U(t',t_0)$ wieder in sich selbst ein, so erhält man eine rekursive Näherung der Form

$$\begin{aligned} U(t,t_0) &= \sum_{n=0}^{\infty} U^{(n)}(t,t_0)\,, \\ U^{(n)}(t,t_0) &= -\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\int_{t_0}^{t}\mathrm{d}t H(t')U^{(n-1)}(t',t_0)\,, \quad U^{(0)}(t,t_0) = 1\!\!1\,. \end{aligned}$$

Führen wir diese Rekursion für den n-ten Term explizit aus, erhalten wir folgendes Mehrfachintegral:

$$U^{(n)}(t,t_0) = \left(\frac{-\mathrm{i}}{\hbar}\right)^n \int_{t_0}^{t}\mathrm{d}t_1\int_{t_0}^{t_1}\mathrm{d}t_2\ldots\int_{t_0}^{t_{n-1}}\mathrm{d}t_n H(t_1)H(t_2)\ldots H(t_n)\,.$$

In dieser Formel ist zu beachten, dass erstens die Obergrenzen der Integrale alle verschieden sind, und dass zweitens die Reihenfolge der Hamilton-Operatoren nicht beliebig ist. So, wie die Formel ausgeschrieben wurde, garantiert die Mehrfachintegration die Ordnung $t_n < t_{n-1} < \ldots < t_2 < t_1 < t$. Physikalisch bedeutet dies, dass die Wirkung des Hamilton-Operators erst zur Zeit t_1 erfolgt, dann zur Zeit $t_2 > t_1$ usw., wobei nie eine Wirkung zu einer späteren Zeit vor der Wirkung zu einer früheren Zeit steht. Dieser Ausdruck ist also korrekt *zeitgeordnet*. Man nennt diese Reihenentwicklung des Zeitentwicklungsoperators *Dyson-Reihe*. Die Zeitordnung ist von immenser Bedeutung, da wir die Hamilton-Operatoren ja nicht mehr beliebig vertauschen dürfen.

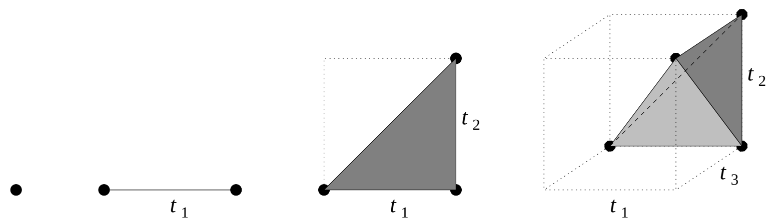
Zeitordnungsoperator. Es ist allerdings recht unpraktisch, explizit an das Einhalten der Zeitordnung denken zu müssen. Außerdem erschwert uns das explizite Einhalten der Zeitordnung enorm, Ausdrücke – wie den für den Zeitentwicklungsoperator – in einfacher Form angeben zu können. Wir wollen daher den gefunden Ausdruck noch etwas umschreiben. Zunächst führen wir eine Funktion (genauer eine Distribution) $\Theta(t_1, \ldots, t_n)$ mit den folgenden Eigenschaften ein:

$$\Theta(t_1, t_2, \ldots, t_n) = \begin{cases} 1 & \text{wenn } t_1 > t_2 > \ldots > t_{n-1} > t_n \\ 0 & \text{sonst} \end{cases} .$$

Mit Hilfe dieser Funktion können wir unseren Ausdruck für $U^{(n)}(t, t_0)$ offensichtlich auch als

$$U^{(n)}(t, t_0) = \left(\frac{-\mathrm{i}}{\hbar}\right)^n \int_{t_0}^{t} \mathrm{d}t_1 \int_{t_0}^{t} \mathrm{d}t_2 \ldots \int_{t_0}^{t} \mathrm{d}t_n \Theta(t_1, t_2, \ldots, t_n) H(t_1) H(t_2) \ldots H(t_n)$$

schreiben. Man beachte, dass jetzt alle Obergrenzen der Integrale gleich sind, da die Funktion $\Theta(t_1, \ldots, t_n)$ garantiert, dass die jetzt hinzugenommenen Teile des Integrationsgebietes nicht beitragen. Für die ersten paar Ordnungen $(n = 0, 1, 2, 3)$ kann man dies graphisch darstellen:



Man erkennt deutlich, dass das ursprüngliche Integrationsgebiet jeweils den Anteil einer n-dimensionalen Pyramide vom Volumen $\frac{1}{n!}(t - t_0)^n$ vom n-dimensionalen Würfel des Volumens $(t - t_0)^n$ ausmacht. Zur Vereinfachung haben wir übrigens vorübergehend die Menge $\Delta = \{(t_1, t_2, \ldots, t_n) : t_i = t_j$ für ein Paar $i, j\}$ von Zeiten, bei denen zwei Zeiten gleich sind, vernachlässigt. Diese Menge hat Maß null und trägt zur Integration nichts bei. Der n-dimensionale Würfel kann aus $n!$ solcher Pyramiden zusammengesetzt werden. In jeder dieser Pyramiden liegt eine andere Ordnung (oder Permutation) der Zeiten vor. So gilt zum Beispiel für den 2-dimensionale Fall, dass im eingefärbten Dreieck (2-dimensionale Pyramide) $t_1 > t_2$ ist, im anderen Gebiet gilt jedoch $t_2 > t_1$. Im 3-dimensionalen Fall ist in der eingefärbte Pyramide $t_1 > t_2 > t_3$. Es gibt fünf weitere Anordnungen, $t_1 > t_3 > t_2$, $t_2 > t_1 > t_3$, $t_2 > t_3 > t_1$, $t_3 > t_1 > t_2$ und $t_3 > t_2 > t_1$, die alle durch Permutationen aus der ursprünglichen Anordnung hervorgehen. Die Gruppe S_n der Permutationen von n Objekten (auch symmetrische Gruppe genannt) hat nämlich genau $n!$ Gruppenelemente. Mit ihrer Hilfe können wir das Mehrfachintegral nochmals umschreiben:

$$U^{(n)}(t, t_0) = \frac{1}{n!} \left(\frac{-\mathrm{i}}{\hbar}\right)^n \int_{t_0}^{t} \mathrm{d}t_1 \int_{t_0}^{t} \mathrm{d}t_2 \ldots \int_{t_0}^{t} \mathrm{d}t_n \sum_{\pi \in S_n} \Theta(t_{\pi(1)}, t_{\pi(2)}, \ldots, t_{\pi(n)}) H(t_{\pi(1)}) H(t_{\pi(2)}) \ldots H(t_{\pi(n)}) .$$

Hierbei bezeichnet $\pi \in S_n$ eine der $n!$ Permutationen der Zahlen $1, 2, \ldots, n$. So gibt z.B. die Permutation $\pi = \binom{1\,2\,3}{2\,3\,1}$ die Permutation an, die die Reihenfolge der Zeiten $t_1 > t_2 > t_3$ in die Reihenfolge $t_2 > t_3 > t_1$ permutiert. Man sollte sich an dieser Stelle nun unbedingt klar machen, dass der gerade eben hingeschriebene Ausdruck für $U^{(n)}(t, t_0)$ genau dasselbe ist, wie der vorher hingeschriebene. Es wird jetzt über den ganzen n-dimensionalen Würfel integriert. Außerdem summieren wir über alle $n!$ Möglichkeiten, eine Zeitordnung einzuführen (zuvor hatten wir eine einzige festgelegt, nämlich $t_1 > t_2 > \ldots > t_{n-1} > t_n$). Die $\Theta(t_1, \ldots, t_n)$-Funktion garantiert, dass für eine gegebene Ordnung auch nur tatsächlich über die n-dimensionale Teilpyramide integriert wird, in der diese Ordnung auch tatsächlich eine Zeitordnung ist. Allerdings gibt es für jede beliebige Permutation genau eine solche Teilpyramide, so dass wir das Integral gegenüber vorher genau $n!$ Mal ausrechnen. Deshalb wird der Ausdruck denn auch mit $1/n!$ multipliziert, um das auszugleichen.

Wir definieren nun einen linearen Operator, den Zeitordnungsoperator $\mathcal{T}$. Dieser wirkt auf Produkte von Operatoren und ist wie folgt für das Produkt von n Operatoren $\mathcal{O}_i$ definiert:

$$\mathcal{T}(\mathcal{O}_1(t_1)\mathcal{O}_2(t_2) \ldots \mathcal{O}_n(t_n)) = \sum_{\pi \in S_n} \Theta(t_{\pi(1)}, t_{\pi(2)}, \ldots, t_{\pi(n)}) \mathcal{O}_{\pi(1)}(t_{\pi(1)}) \mathcal{O}_{\pi(2)}(t_{\pi(2)}) \ldots \mathcal{O}_{\pi(n)}(t_{\pi(n)}) .$$

Dieser Operator gibt für eine beliebige Auswahl von n verschiedenen Zeitpunkten $t_1, \ldots, t_n$ genau die eine Reihenfolge der Operatoren aus, für die Zeitordnung vorliegt. Damit garantiert $\mathcal{T}$, dass die den Operatoren entsprechenden Wirkungen bzw. Messungen auch in der Tat der Reihe nach in der Zeit ausgeführt werden, so dass der Ausdruck physikalisch Sinn machen kann. Man kann zeigen, dass $\mathcal{T}$ ein linearer und wohldefinierter Operator ist. Mit ihm läßt sich nun der n-te Term unseres Zeitentwicklungsoperators einfach schreiben als

$$U^{(n)}(t,t_0) = \frac{1}{n!}\left(\frac{-\mathrm{i}}{\hbar}\right)^n \int_{t_0}^t \mathrm{d}t_1 \int_{t_0}^t \mathrm{d}t_2 \ldots \int_{t_0}^t \mathrm{d}t_n \mathcal{T}(H(t_1)H(t_2)\ldots H(t_n))\,.$$

Es ergibt sich also für den allgemeinen Fall die Lösung

$$U(t,t_0) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!}\left(\frac{-\mathrm{i}}{\hbar}\right)^n \int_{t_0}^t \mathrm{d}t_1 \int_{t_0}^t \mathrm{d}t_2 \ldots \int_{t_0}^t \mathrm{d}t_n \mathcal{T}(H(t_1)H(t_2)\ldots H(t_n) = \mathcal{T}\left(\exp\left(-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\int_{t_0}^t \mathrm{d}t' H(t')\right)\right),$$

wobei wir beim letzten Gleichheitszeichen die Linearität von $\mathcal{T}$ ausgenutzt haben um die Reihe als Exponentialfunktion zusammenzufassen.

Der Vorteil der Zeitordnung. Dies mag nun wirklich sehr umständlich erscheinen. Aber das Einführen des Zeitordnungsoperators hat einen ganz großen Vorteil. Wenn für die Beschreibung eines physikalschen Phänomens verschiedene Observablen nacheinander ins Spiel kommen, so ist bei Zeitabhängigkeit dieser Observablen die Reihenfolge von entscheidender Bedeutung. In diesem Fall muss das Resultat immer in zeitgeordneter Form geschrieben werden, da die Messung einer Observablen zu einer späteren Zeit nicht vor der Messung einer Observablen zu einer frühren Zeit stattfinden kann.

Hat man sich nun einmal klar gemacht, dass ein Operator existiert (und ggfls. explizit angegeben werden kann), der einen beliebigen Ausdruck in eine zeitlich geordnete Form überführt, so können wir uns eine Menge Arbeit ersparen. Wenn nämlich alle involvierten Observablen zu gleichen Zeiten kommutieren, $[\mathcal{O}_i(t), \mathcal{O}_j(t)] = 0$, und nur zu verschiedenen Zeiten nicht mehr kommutieren, $[\mathcal{O}_i(t'), \mathcal{O}_j(t'')] \neq 0$ dann dürfen wir den Ausdruck beliebig manipulieren ohne darauf zu achten, ob z.B. beim Vertauschen zweier Observablen die zeitliche Reihenfolge verändert wird und daher ein Kommutatorterm auftreten müsste. Wir können also die Observablen unterhalb des $\mathcal{T}$ Zeitordnungsoperators *wie klassische Größen* behandeln! Die korrekte Zeitordnung stellen wir einfach am Schluß durch Anwenden von $\mathcal{T}$ her. Dieses Vorgehen wird uns in der relativistsichen Quantenmechanik noch öfters begenen. Da dort Zeit nicht mehr als Parameter, sondern als Koordinate auftritt, lassen sich viele Ausdrücke ohne den Zeitordnungsoperator ohnehin nicht mehr explizit angeben.

$[\boldsymbol{H(t)}, \boldsymbol{H(t')}] \neq \mathbf{0}$. Der hier beschriebene Fall des Zeitentwicklungsoperators erfüllt alle Voraussetzungen, da nur eine einzige Observable involviert ist, d.h. alle $\mathcal{O}_i = H$. Das Resultat zeigt deutlich, dass sich die Ausdrücke unter $\mathcal{T}$ wir klassische Größen verhalten. Vergleicht man nämlich die Lösung für den Zeitentwicklungsoperator im allgemeinen Fall mit der für den Fall, dass die Hamilton-Operatoren zu verschiedenen Zeiten vertauschen (sich also “klassisch” benehmen), so sieht man, dass der einzige Unterschied in der Formel der vorangestellte Zeitordnungsoperator $\mathcal{T}$ ist.

$$\begin{aligned} U(t,t_0) &= \exp\left(-\tfrac{\mathrm{i}}{\hbar}\textstyle\int_{t_0}^t \mathrm{d}t' H(t')\right) \qquad &&\text{wenn} \quad [H(t'), H(t'')] = 0\,, \\ &= \mathcal{T}\exp\left(-\tfrac{\mathrm{i}}{\hbar}\textstyle\int_{t_0}^t \mathrm{d}t' H(t')\right) \qquad &&\text{wenn} \quad [H(t'), H(t'')] \neq 0\,. \end{aligned}$$

Warnung. So schön der Zeitordnungsoperator auch ist, er kann nicht alles. Wenn wir zum Beispiel $\mathcal{O}_1 = z$ und $\mathcal{O}_2 = p_z$ setzen, so sind diese Observablen gar nicht explizit von der Zeit abhänging. Dennoch kommutieren sie bekanntlich nicht, $[p_z, z] = \mathrm{i}\hbar$. Ein Anwenden des Zeitordnungsoperators hat hier gar keine Wirkung. Mehr noch, wenn die Observablen $\mathcal{O}_i$ für gleiche Zeiten nicht miteinander vertauschen, können wir den Zeitordnungsoperator nicht ohne weiteres anwenden. Dieses Problem wird in der relativisitschen Quantenmechanik noch sehr viel deutlicher zu Tage treten, gerade weil dann die Zeit nicht mehr als externer Parameter sondern als gleichberechtigte Koordinate auftritt. Es wird sich herausstellen, dass man neben der Zeitordnung noch weitere Regeln zu beachten hat, wie physikalisch relevante Ausdrücke zu ordnen sind. Ein weiteres solches Ordnungsverfahren heisst Normalordnung, und wird das Problem von Operatoren zu gleichen Zeiten (oder zu gleichen Raum-Zeit-Koordinaten) beheben. Doch davon mehr zu einem späteren Zeitpunkt . . . ;-)