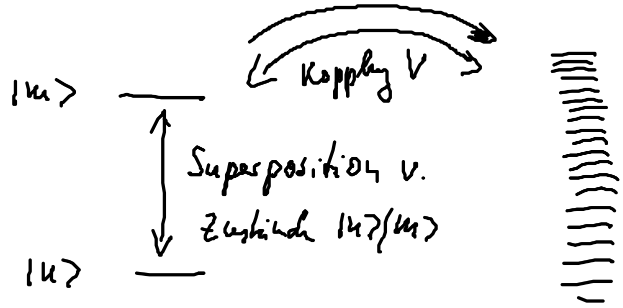
b) Dämpfung v. Quanteninterferenzen

System H_S



Umgebung H_B (Bad, wenn viele Freiheitsgrade und durch System wenig beeinflußt)

$\rho_{nm} \neq 0$

$\Downarrow$

Berechnung von Systemoperatoren $\{O_s\}$

Badoperatoren $\{B_\alpha\}$

$\Downarrow$

Zeitrichtung irreversible Prozesse

$$H = H^S + H^B + V$$

bekannt: $H^S |n\rangle = \varepsilon_n |n\rangle$

analog f. Bad

Techniken i.a. f. Faktoren v. Liouville operator günstig, gibt direkten Zugang

$$\dot{\rho} = -\frac{i}{\hbar}[H, \rho] = -\frac{i}{\hbar}\left(H\rho - \rho H\right)$$

$$\dot{\rho}_{nm} = -\frac{i}{\hbar}\left(\langle n| H\rho |m\rangle - \langle n|\rho H|m\rangle\right)$$

$\sum_l |l\rangle\langle l|$

$[B_\alpha, O_S] = 0$

$$= -\frac{i}{\hbar}\sum_l \left(H_{nl}\rho_{lm} - \rho_{nl}H_{lm}\right)$$

$$H^S_{nl} = \varepsilon_n \delta_{nl} = \hbar\omega_n \delta_{nl}$$

$$H^B_{nl} = H^B \delta_{nl}$$

V_{nl} muß spezifiziert werden f. Modelle

$$\rho_{nm} = \langle n|\rho(O_S, B_\alpha)|m\rangle = f(B_\alpha)$$

Funktion d. Badoperatoren

$$\dot{\rho}_{nm} = -i(\omega_n - \omega_m)\rho_{nm}$$ System

$$-\frac{i}{\hbar}\left([H_B, \rho]\right)_{nm}$$ Bad

$$-\frac{i}{\hbar}\sum_l \left(V_{nl}\rho_{lm} - \rho_{nl}V_{lm}\right)$$ WW

$\langle O_S\rangle$ = Ziel

$$\langle O_S\rangle = sp\left(O_S\,\rho(t)\right)$$

Dipolmoment

$$= \sum_{n,\alpha} \langle\alpha|\langle n|O_S\,\rho(t)|n\rangle|\alpha\rangle$$

$$= \sum_\alpha \langle\alpha| \sum_{n,m} \underbrace{\langle n|O_S|m\rangle}_{\text{Matrixelemente im Schrödingerbild z.B. Dipolmomente}} \underbrace{\langle m|\rho(t)|n\rangle}_{\rho_{mn}(t) \text{ ist wirklich sinnvoll!}} |\alpha\rangle$$

$$= \sum_{n,m} O^S_{nm} \underline{\sum_\alpha \langle\alpha|\rho_{mn}|\alpha\rangle} = \sum_{n,m} O^S_{nm} \underbrace{\sum_\alpha \rho^\alpha_{mn}}_{\rho_{mn} \text{ abgespurt über Bad}}$$

Beispiel – sehr spezielles Modell

aus der VL Zweiniveausystem gekoppelt an <u>Phonon</u>

$|c\rangle$ —— $\underline{|\alpha\rangle}$

$|v\rangle$ —•— ← kein Kopplg. in Born Oppenheimer

<u>Independent</u> Boson Modell

$$V = \sum_\alpha g^\alpha_{vc}\, a_c^\dagger a_c B_\alpha$$

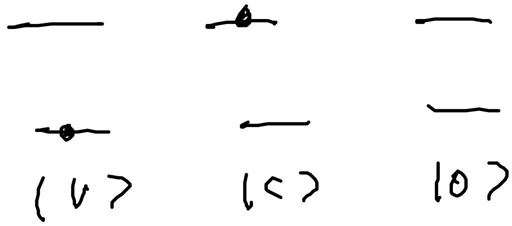
Phononauslenkung

$(b_\alpha^\dagger + b_\alpha)$

$$H_B = \sum_\alpha \hbar\omega_\alpha b_\alpha^\dagger b_\alpha$$

Keine Phonon-Phonon WW

Systemzustand $|n\rangle$, Jeder n



Matrixelement $V_{nn} = ?$

1) $\langle v|\, a_c^\dagger a_c \,|c\rangle = \langle v|\, a_c^\dagger a_c\, a_c^\dagger \,|0\rangle$

$= \langle v|\, a_c^\dagger \big(1 - a_c^\dagger \underbrace{a_c \big)\, |0\rangle}_{0} = \langle v|\, a_c^\dagger \,|0\rangle = \langle v|c\rangle$

$\underline{\underline{= 0}}$

2) $\langle c|\, a_c^\dagger a_c \,|v\rangle = 0$

3) $\langle c|\, a_c^\dagger a_c \,|c\rangle = 1$

4) $\langle v|\, a_c^\dagger a_c \,|v\rangle = 0$

$$\dot{\rho}_{cv} = -i(\omega_c - \omega_v)\rho_{cv} - \frac{i}{\hbar}[H_B, \rho_{cv}] - \frac{i}{\hbar} V_{cc}\rho_{cv}$$

System

Bewegungsgl. f. Übergangsamplitude

einzige Matrixelement das überlebt

Liouville Operator

$$\dot{\rho}_{cv} = -i\omega_{cv}\rho_{cv} - iL_B\rho_{cv} - \frac{i}{\hbar}\sum_\alpha g^\alpha_{vc} B_\alpha \rho_{cv}$$

$$\rho_{cv}(B_\alpha)$$

$$\frac{g^\alpha_{vc}}{\hbar} \equiv g^\alpha$$

wie wirkt L_B auf ein Badoperator?

Zwischenrechnung

$$e^{iL_B t} B_\alpha = \underbrace{e^{+iH_B t/\hbar} B_\alpha e^{-iH_B t/\hbar}}_{\text{Wechselwirkungsbild bzg. } H_B}$$

$$= B_\alpha(t)$$

Ansatz: $\rho_{cv} = e^{-i\omega_{cv}t} e^{-iL_B t} \nu_{cv}(t, \{B_\alpha\})$

$$\downarrow$$

$$\dot{\rho}_{cv} = -i\omega_{cv}\rho_{cv} + e^{-i\omega_{cv}t} e^{-iL_B t}(-iL_B)\nu_{cv}(t, \{B_\alpha\})$$

vertauscht

$$+ e^{-i\omega_{cv}t} e^{-iL_B t}\dot{\nu}_{cv}(t, \{B_\alpha\})$$

einsetzen gibt:

$$e^{-iL_B t}\dot{\nu}_{cv} = -i\sum_\alpha g_\alpha B_\alpha e^{-iL_B t}\nu_{cv} \qquad \Big|\, e^{iL_B t}$$

invers

$$\dot{v}_{cv} = e^{iL_B t}\left(-i \sum_\alpha g_\alpha B_\alpha\right) e^{-iL_B t} v_{cv}$$

$$= -i\, e^{iH_B t}\left(\sum_\alpha g_\alpha B_\alpha\, e^{-iH_B t} v_{cv}\, \overbrace{e^{+iH_B t}\Big)\, e^{-iH_B t}}^{=1}\right.$$

$$\dot{v}_{cv} = -i \sum_\alpha g^\alpha B_\alpha(t)\, v_{cv}$$

typ. Operatorgleichung die iterativ gelöst werden kann wenn Anfangsbedingung gegeben ist $v_{cv}(t_0)$.

$$v_{cv}(t) = v_{cv}(t_0) - i \int_{t_0}^{t} dt' \sum_\alpha g^\alpha B_\alpha(t')\, v_{cv}(t')$$

kann iterativ gelöst werden!

Anfangsbedingung:

$$\rho_{cv}(t_0) = \langle c|\rho(t_0)|v\rangle = \langle c|\rho_B(t_0)\sigma_S(t_0)|v\rangle$$

WW wird bei t_0 eingeschaltet

System u. Bad sind statistisch unabhängig

$$= \underbrace{\sigma_{cv}(t_0)}\, \underbrace{\rho^B(t_0)}$$

AB, übliches kanonisch Optor
ophisch $e^{-H_B\beta}$
präpariert

<u>Vorgriff auf Lösung</u>:

$\sum_\alpha \rho_{cv}^\alpha(t)$ f. Observable

Phononzahl bei t_0

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

Emission v. Phonon

Absorpt. v. Phonon

Energieverschiebg.

wird beobachtet in Molekülen, Quantenpunkte ... die an Phonon gekoppelt sind

3/ Formale Theorie d. Zeitentwicklung

Handwerkszeug um Gleichg. f. ν_{cv} zu lösen

$$\dot{\nu} = -i\phi(t)\,\nu$$

ν, ϕ sind Operatoren, zeitabhängig

ist ganz typische Gleichg., denn

a/ Schrödingergl. $i\hbar\dot{\varphi} = H(t)\varphi \rightarrow \dot{\varphi} = -i\frac{H(t)}{\hbar}\varphi$

b/ von Neumanngl. $i\hbar\dot{\rho} = L(t)\rho \Rightarrow \dot{\rho} = -i\frac{L(t)}{\hbar}\rho$

3.1. Die von Neumann Reihe

Such Lösung der Gleichg. $\rho(t) = \rho(t_0) - i\int_{t_0}^{t} dt_1\, \phi(t_1)\,\rho(t_1)$

Iteration!

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

immer weiter

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

wenn Zahl:

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

wäre Lösg., wenn ϕ, ρ Zahl wären

a/ wenn ϕ Zahl wäre: $\rho(t_0) \equiv 1$

0. Term : $\rho(t) = 1$

1. Term : $\rho(t) = 1 - i \int^{t} dt' \, \phi(t')$

2. Term : $\rho(t) = 1 - i \int^{t} dt' \, \phi(t') + (-i)^2 \int^{t} dt_1 \int^{t_1} dt_2 \, \phi(t_1)\phi(t_2)$

$t \quad \frac{1}{2!}$

$$\overset{?}{=} \frac{(-i)^2}{2!} \left(\int^{t} dt' \, \phi(t') \right)^2$$

$$(-i)^2 \int^{t} dt_1 \int^{t_1} dt_2 \, \phi(t_1)\phi(t_2) = (-i)^2 \int^{t} dt_1 \int^{t} dt_2 \, \theta(t_1 - t_2)\, \phi(t_1)\phi(t_2)$$

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

nochmal um $\frac{1}{2!}$

zu kompensieren

$t_1 \leftrightarrow t_2$

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

wenn ϕ ein Zahl ist: $[\phi(t_2), \phi(t_1)]_- = 0$

Zahl: $\frac{(-i)^2}{2} \int^{t} dt_1 \int^{t} dt_2 \, \underbrace{\left(\theta(t_1 - t_2) + \theta(t_2 - t_1) \right)}_{} \phi(t_1)\phi(t_2)$

1

$$= \frac{(-i)^2}{2!} \left(\int^t dt' \, \phi(t') \right)^2$$

Operator:

$$\equiv \frac{(-i)^2}{2!} \int^t dt_1 \int^t dt_2 \; T \, \phi(t_1) \phi(t_2)$$

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

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

T: Zeitordnungsoperator

$$T \, \phi(t_1)\phi(t_2)\phi(t_3) = 3! \text{ Terme}$$

Formel:

$$\int^t dt_1 \cdots \int^{t_{i-1}} dt_i \cdots \int^{t_{n-1}} dt_n \; \phi(1) \cdots \phi(i) \cdots \phi(n)$$

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

$$= T \frac{1}{n!} \left(\int^{t} \cdots \right)^{n}$$

$$\boxed{p(t) = \underset{\text{Opter}}{T}\, e^{-i \int_{t_0}^{t} \phi(t')}\, p(t_0)}$$

hinter T kann in Exponent wie mit Zahl gerechnet werden, T ordnet nachfolgend die Zeiten (R. Feynman: Operatorrechnung.)