b) Dämpfung v. Quanteninterferenzen

System H_S $|m\rangle$ $|n\rangle$

Superposition v. Zuständen $|n\rangle, |m\rangle$

Kopplung V

Umgebung H_B

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

$\Downarrow$

Zeitrichtung irreversible Prozesse

$\rho_{nm} \neq 0$

$\downarrow$

Berechnung von Systemoperatoren $\{O_S\}$

Badoperatoren $\{B_\alpha\}$

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

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

analog f. Bad

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

$$\dot{\rho} = -\frac{i}{\hbar}[H,\rho] = -\frac{i}{\hbar} H\rho - \rho H$$

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

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

$$[B_\alpha, O_S] = 0$$

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

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

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

V_{nl} muß spezifiziert werd f. Modell

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

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

$$\langle O_S\rangle = \text{Ziel}$$

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

Dipolmoment

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

$$= \sum_\alpha \langle\alpha| \sum_{n,m} \underbrace{\langle n|O_S|m\rangle}_{\substack{\text{Matrixelemente} \\ \text{im Schrödinger-} \\ \text{bild} \\ \text{z.B.} \\ \text{Dipolmatrix}}} \underbrace{\langle m|\rho(t)|n\rangle}_{\substack{\rho_{nm}(t) \\ \text{ist wirklich} \\ \text{sinnvoll!}}} |\alpha\rangle$$

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

Beispiel – sehr spezielles Modell

aus der VL Zweiniveausystem gekoppelt an Phononen

$|c\rangle$ —— $|\alpha\rangle$

$|v\rangle$ —o— ← kein Kopplung in Born Oppenheimer

Independent Boson Modell

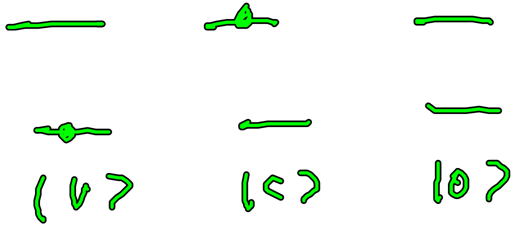
$$V = \sum_\alpha g^\alpha_{vc} a_c^\dagger a_c B_\alpha$$

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

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

Keine Phonon-Phonon WW

Systemzustand $|n\rangle$, Jeder n



Matrixelement $V_{\kappa\kappa} = ?$

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

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

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

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

Liouvilleoperator

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

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

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

wie wirkt L_B auf ein Badoperator?

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

$$= B_\alpha(t)$$

Zwischen-rechnung

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

$$\downarrow$$

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

vertauscht

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

einsetzen gibt:

$$e^{-iL_B t}\dot{v}_{cv} = -i\sum_\alpha g_\alpha B_\alpha e^{-iL_B t} v_{cv} \quad \Big| \; e^{iL_B t}$$

invers

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

$$= -i \, e^{iH_B t} \Big(\sum_\alpha g_\alpha B_\alpha \, e^{-iH_B t} \, \nu_{cv} \, \underbrace{e^{+iH_B t} \Big) e^{-iH_B t}}_{=1}$$

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

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

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

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 Opfer
optisch $e^{-H_B\beta}$
präpariert

Vorgriff auf Lösung:

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

Phononzahl bei t_0

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

Energieverschiebg.

Emission v. Phonon

Absorpt. v. Phonon

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 d. Gleichg. $p(t) = p(t_0) - i\int_{t_0}^{t} dt_1\, \phi(t_1)\, p(t_1)$

Iteration!

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

immer weiter

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

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

wäre Lösg., wenn ϕ, p Zahl wären

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

0. Term : $p(t) = 1$

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

2. Term : $p(t) = 1 - i\int^t dt'\, \phi(t') + \underbrace{(-i)^2 \int^t dt_1 \int^{t_1} dt_2\, \phi(t_1)\phi(t_2)}_{\overset{?}{=} \frac{(-i)^2}{2!}\left(\int^t dt'\, \phi(t')\right)^2}$

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

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

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

$2\cdot$

wodurch 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:

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

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

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

T: Zeitordnungsoperator

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

Formel:

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

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

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

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

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