I. Einführung

Warum Diagramme?

Jeder hier kennt (zeitliche) Störungstheorie

Wichtig

$$H = \underbrace{H_0}_{\text{ungestörte Hamiltonoperator}} + \underbrace{V}_{\text{Störung (meist zeitlich veränderlich)}}$$

Bei zeitlicher Störung $\Rightarrow$ Wechselwirkungsbild

Störungstheorie höher als erste Ordnung, meist aufwendig und nervtötend.

Idee: Stelle Wirkung der Störung graphisch dar! Mit festen Regeln und übersetze Ergebnisse direkt in Formel! und denke in Diagrammen!

Wo wird berechnet?

Meist mehrzeitige Korrelationsfunktionen!

z.B. Berechnung der Polarisation

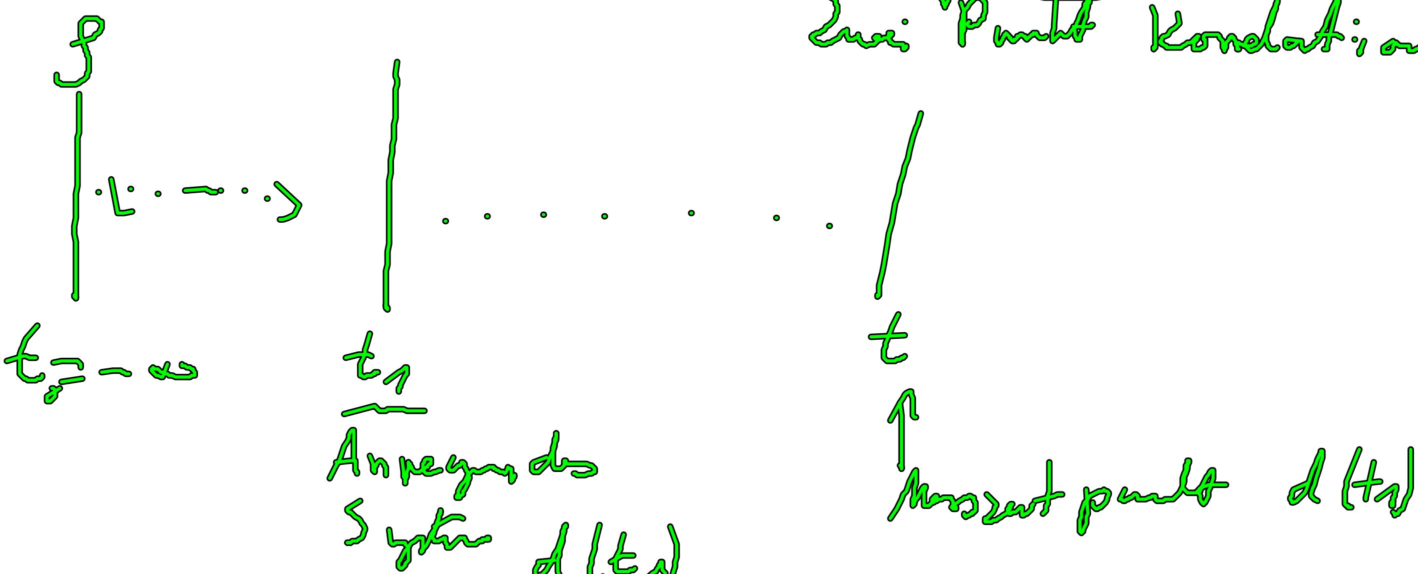
Observable in der Optik ist die Polarisation

Klassisch $\quad P \propto \underbrace{d}_{\text{Dipolmoment}} \quad d = \underset{\substack{\uparrow \\ \text{Ort des} \\ \text{Elektrons}}}{r} \cdot \underset{\substack{\uparrow \\ \text{Ladung}}}{e}$

Also QM

$$P(t) = tr(d(t)\underbrace{\rho(t)}_{\substack{\text{Entwicklung nach} \\ \text{externer Störung}}})$$

dann $P^{(1)}(t) \propto tr(\underbrace{d(t)\, d(t_1)}_{\text{Zwei Punkt Korrelationsfkt.}}\, \rho(t_0))$



Höhere Störungen ergeben andere Korrelationsfunktionen

z.B. $P^{(3)}(t) \propto \sum \ldots tr(d(t)\, d(t_1)\, d(t_2)\, \rho(t_0))$

$+ \ldots tr(d(t_1)\, d(t)\, d(t_2)\, \rho(t_0))$

$+ \uparrow \ldots -$

Flkt. Responsefkt
Sie werden durch Diagramme dargestellt / abgeleitet.

Welche Zutaten brauchen wir für die Diagramme

II.1) Dichtematrix: Muß eingeführt werden für Diagramme im Liouville-raum! Grundgleichungen der Quantendynamik

II.2 Liouville Raum Abstrakt mithilfe Superoperatoren darstellen

II.3 Herleitung der Bilder Motivation der Propagation Wechsel zwischen Hilbert und Liouvilleraum.

II.4 +, − und L, R Algebra, intuitive Algebra um Störung zu untersuchen

III. Einführung in doppelseitige Feynmandiagramme

IV Keldysh artige Open und Closed Loop Diagramme

V Bewegungsgleichungen: Relaxation System + Reservoir.

II Wiederholung und mathematisches Rüstzeug

II.1 Dichtematrix und Liouville von Neumann-Gl.

Motivation

Quantenmechanik

Zustand des Systems wird durch (Vielteilchen-) Wellenfkt. $|\psi\rangle$ beschrieben

Zeitliche Entwicklung

$i\hbar\,\partial_t|\psi\rangle = H|\psi\rangle$ Schrödingergl.

Probleme:
- Oft nicht klar wie System präpariert wurde
- Messung meist an ein Ensemble (gleichartiger) Systeme oder
- Häufige Wiederholung der Messung am gleichen System
- Umgebung beeinflußt System, führt somit stat. Fluktuationen.

Lösung:

Dichtematrix:

reiner Zustand

$$\rho = |\psi\rangle\langle\psi|$$

Zeitliche Dynamik (Schrödinger Bild)

$$\partial_t\rho = \underbrace{\partial_t|\psi\rangle}_{-\frac{i}{\hbar}H|\psi\rangle}\langle\psi| + |\psi\rangle\underbrace{\partial_t\langle\psi|}_{\frac{i}{\hbar}\langle\psi|H}$$

$$= -\frac{1}{\hbar}(H\varrho - \varrho H) = -\frac{i}{\hbar}[H,\varrho]_-$$

$$\boxed{\partial_t \varrho = -\frac{i}{\hbar}[H,\varrho]_-}$$ Liouville von Neumann Gl. für Dynamik

<u>Nachteil</u>: Aus Wellenfkt in N Dimensionalem Hilbertraum N^2 dimensional für Dichtematrix

<u>Annahme</u> Verschiedene Möglichkeit das System zu präparieren $\{|\psi_n\rangle\}$ mit Wahrscheinlichkeit p_n.
(z. B. Ensemble gleichartiger QS, mehrfache Wiederholung der Messung)

Dann ist:

$$\varrho = \sum_n p_n |\psi_n\rangle\langle\psi_n|$$

Auch hier gilt:

$$\boxed{\partial_t \varrho = -\frac{i}{\hbar}[H,\varrho]_-}$$

da
$$\partial_t \varrho = \sum_n p_n \partial_t |\psi_n\rangle\langle\psi_n|$$
$$= \sum_n p_n \left(-\frac{i}{\hbar}\right)[H, |\psi_n\rangle\langle\psi_n|]$$
$$= -\frac{i}{\hbar}[H,\varrho]_-$$

<u>Wichtig</u>: Die Techniken im folgenden funktionieren <u>nicht</u> am einzelnen System bei einmaliger Zeitentwicklung!

Eigenschaften der Dichtematrix

p_n sind Wahrscheinlichkeit $\quad \sum_n p_n = 1$

Wichtige Größe ist die Spur

Sei $\{|n\rangle\}$ ONB dann ist:

$$\mathrm{tr}(A) := \sum_n \langle n|A|n\rangle = \sum_n \langle n|\underbrace{\mathbb{1}}_{=\sum_m |m\rangle\langle m|} A|n\rangle = \sum_{nm} \langle n|m\rangle\langle m|A|n\rangle$$

mit anderer ONB $\{|m\rangle\}$

$$= \sum_{mn} \langle m|A|\underbrace{n\rangle\langle n}_{\mathbb{1}}|m\rangle = \sum_m \langle m|A|m\rangle$$

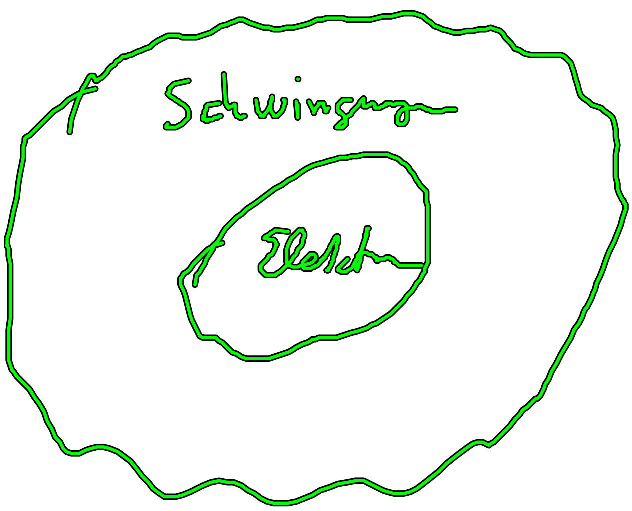
$$\mathrm{tr}(\rho) = \sum_n \langle n|\sum_m p_m|\psi_m\rangle\langle\psi_m|n\rangle = \sum_m p_m \langle\psi_m|\underbrace{\sum_n |n\rangle\langle n|}_{=\mathbb{1}}\psi_m\rangle$$

$$= \sum_m p_m = 1$$

Vorteile der Dichtematrix

Einfache Behandlung von offenen Systemen!

Beispiel



Elektron gekoppelt an Schwingungen

Bipartites System Vektoren des Gesamtsystems ist Tensorprodukt der Einzelsysteme

$\{|n\rangle_e\}$ Basis des elektr. Systems, $\{|m\rangle_v\}$ Basis des Schwingungssystems.

Dann $\{|n\rangle_e \otimes |m\rangle_v\}$ Basis Gesamtsystem.

Konstruktion der Dichtematrix im elektronischen System:

Wichtig $\rho \neq \rho_e \otimes \rho_v$, außer im Gleichgewicht bei ungekoppelten System.

$$\rho_{el} = tr_{Bath}(\rho) = \sum_m \underbrace{\langle m|_v \rho |m\rangle_v}$$

Operator auf dem el. Hilbertraum

$\Longrightarrow$ Damit Relaxationsgl. herleiten siehe $\underline{V}$

Ergo: Dichtematrix erlaubt Umgebungseinflüsse einzubinden!

II. 2 Liouville Raum und Superoperatoren

ρ Operator auf dem Hilbert-Raum

Liouville von Neumann Gl.

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

Definieren Operator der auf Operatoren auf Hilbertraum wirkt.

$$-\frac{i}{\hbar}\mathcal{L}A := -\frac{i}{\hbar}[H, A].$$

Diese Art Operator nennt man Superoperator, speziell $\mathcal{L}$ wird „Liouvillian" analog zum Hamiltonian

<u>Bemerkung:</u> Streng mathematisch ist der Liouvilleraum auch ein Hilbertraum. Superoperatoren sind Operatoren auf diesem Hilbertraum/Liouvilleraum

$$\langle\langle A | B \rangle\rangle = tr(A^+ B)$$

Vergleich Hilbert und Liouvilleraum gegenüber:

$\|\psi\rangle = \sum_n \underset{\uparrow \text{ONB}}{\langle n\|\psi\rangle} \|n\rangle = \sum_n c_n \underset{\uparrow \text{Basisdarst.}}{\underline{\|n\rangle}}$	$\rho = \sum_{nm} \|n\rangle\langle n\|\rho\|m\rangle\langle m\|$
	$= \sum_{nm} \langle n\|\rho\|m\rangle \|n\rangle\langle m\|$
	$= \sum_{nm} \rho_{nm} \underbrace{\|n\rangle\langle m\|}_{\text{Basisschritt}}$
$i\hbar\partial_t\|\psi\rangle = H\|\psi\rangle$	$i\hbar\partial_t\rho = \mathcal{L}\rho$

II.3 +, − und L-R Algebra

1) Die L-R Algebra im Liouvilleraum

<u>Definition</u> Sei A bel. Operator im Hilbertraum

$$\underset{\uparrow\ \text{Superoperator}}{A_L}\rho = \underset{\uparrow\ \text{Operator auf Hilbertraum}}{A}\rho \qquad \underset{\uparrow\ \text{Superoperator}}{A_R}\rho = \rho \underset{\uparrow\ \text{Normaler Operator}}{A}$$

<u>Rechenregel (Kettenregel)</u>

$(BA)_L \rho = BA\rho = B A_L \rho = B_L A_L \rho$

|| Also $(BA)_L = B_L A_L$ ||

$(BA)_R \rho = \rho (BA) = \rho BA = A_R (\rho B) = A_R B_R \rho$

|| $(BA)_R = A_R B_R$ || Merke Ordnung der Operatoren im Hilbertraum dreht bei R bzgl. der Ordnung im Liouvilleraum um.!

2. Die +,− Algebra

Definition

$$O_- = O_L - O_R$$

$$O_+ = \frac{1}{2}(O_L + O_R)$$

Können die Linear Kombinationen der L−R Operatoren als Matrix darstellen

$$U \hat{=} \begin{pmatrix} 1 & -1 \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \end{pmatrix} \Rightarrow \det U = 1$$

Symmetrische Definition

$$O_- = \frac{1}{\sqrt{2}}(O_L - O_R)$$

$$O_+ = \frac{1}{\sqrt{2}}(O_L + O_R)$$

$$\| \; i\hbar\,\partial_t \rho = \mathcal{L}\rho = H_-\rho \; \| = H_L\rho - H_R\rho = H\rho - \rho H = [H,\rho]$$

Umkehrung berechnen:

$$O_L = \frac{1}{2} O_- + O_+$$

$$O_R = -\frac{1}{2} O_- + O_+$$

Rechenregel (für vertauschende Operatoren A, B)

$$\| \; (AB)_- = (AB)_L - (AB)_R = A_L B_L - B_R A_R = A_L B_L - A_R B_R$$

$$= \frac{1}{2} A_L B_L - \cancel{\frac{1}{2} A_L B_R} + \cancel{\frac{1}{2} A_R B_L} - \frac{1}{2} A_R B_R + \frac{1}{2} A_L B_L - \frac{1}{2} A_R B_R - \cancel{\frac{1}{2} A_R B_L} + \cancel{\frac{1}{2} A_L B_R}$$

$$= \frac{1}{2}(A_L + A_R)(B_L - B_R) + \frac{1}{2}(A_L - A_R)(B_L + B_R)$$

$$= A_+ B_- + A_- B_+ \; \|$$

Analog $\| \; (AB)_+ = A_+ B_+ + A_- B_- \; \|$

Weitere Regeln

$$\| \; tr(A_- B) = tr(AB) - \underbrace{tr(BA)}_{tr(AB)} = 0 \; \|$$

Observable? O

$$\| \; \underset{tr(\rho O)}{\overset{}{tr(O\rho)}} = tr(O_L \rho) = tr(O_R \rho) = tr(O_+ \rho)$$

Weiterhin gilt für A, B bel. Operatoren:

$$A_L B_R = B_R A_L$$

Bew.:

$$A_L B_R \varrho = A_L(\varrho B) = A \varrho B = B_R (A \varrho) = B_R A_L \varrho \qquad \square$$

D.h. im Prinzip ist die Ordnung auf der rechten Seite von der Ordnung auf der linken Seite unabhängig!