III Einführung in doppelseitige Feynmandiagramme

Übersicht

1. Zwei Korrelationsfunktionen

Welche Ausdrücke wichtig? Was für Größen kommen vor?
Was kann man Diagrammen ausdrücken!

2. Entwicklung nach einer Störung

Grundgleichungen, Grundregeln. Identitäten für Diagramme (Doppelseitige Feynmandiagramme)

3. Darstellung mittels Greenfkt

4. Regel um Diagramme aufzustellen

u.a. RWA, Dipolauswahlregeln Bsp. Absorptionsspektren

2D Spektroskopie (zum Üben); 2D Photonecho, Double Quantum coherence usw.

5. Diagramme markieren

Verfahren um Diagramme zu trennen.

6. Kontinuierliche Störung

CW Operator Lsg. im Fourierraum.

III.1 Mehrzeitige Korrelationsfunktion

Ziel: Observable berechnen (QM)

Beispiel: Optik

Observable beinflußt über Lichtfeld, geht im Polarisation ein.

$$P(t) = \langle \hat{\mu}(t) \rangle = tr(\hat{\mu}(t)\,\rho(t))$$

$$\hat{\mu} = e\,\hat{r}_{\tau} \quad \text{Ortsoperator}$$

Bei optischen Experimenten wird System in der Regel optisch getrieben.

$$H_1(t) = \hat{\mu} \cdot E(t)$$

$$P(t) = tr\left(\left(U^{+}_{0,-}(t,t_0)\hat{\mu}(t_0)\right) T_{\leftarrow} \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t} d\tau\, U^{+}_{0,-}(\tau,t_0) H_{1,-}(\tau) U_{0,-}(\tau,t_0)\right)\rho(t_0)\right)$$

$$= tr\Big(\underbrace{\hat{\mu}(t_0)}_{\text{Observable}}\, \underbrace{U_{0,-}(t,t_0)\, T_{\leftarrow} \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t} d\tau\, U^{+}_{0,-}(\tau,t_0) H_{1,-}(\tau) U_{0,-}(\tau,t_0)\right)}_{\text{Hier ist Störung, das wird bzgl. } H_1 \text{ entwickelt.}}\, \underbrace{\rho(t_0)}_{\text{Grundzustand}}\Big)$$

n-te Ordnung

$$P^{(n)}(t) = \frac{\left(-\frac{i}{\hbar}\right)^n}{n!} tr\left(\hat{\mu}(t_0)\, U_{0,-}(t,t_0)\, T_{\leftarrow}\left(\int_{t_0}^{t} d\tau\, U^{+}_{0,-}(\tau,t_0) \underbrace{H_{1,-}(\tau)}_{(= H_{1,L}(\tau) - H_{1,R}(\tau))} U_{0,-}(\tau,t_0)\right)^n \rho_0\right)$$

$$= \frac{\left(-\frac{i}{\hbar}\right)^n}{n!} tr\left(\hat{\mu}(t_0)\, U_{0,-}(t,t_0)\, T_{\leftarrow}\left(\int_{t_0}^{t} d\tau\, U^{+}_{0,-}(\tau,t_0)\, \underbrace{(H_{1,L}(\tau) - H_{1,R}(\tau))}_{\text{Wechselwirkung n-mal zwischen } t \text{ und } t_0}\, U_{0,-}(\tau,t_0)\right)^n \rho_0\right)$$

Observable am Ende

Wichtig! Zeitordnung auf beiden Seiten der Dichtematrix zusammen

Zwischen zwei Wechselwirkungen propagiert das System mit U_0

Bsp Ausdruck in 3. Ordnung

$$P^{(3)}(t) = \frac{\left(-\frac{i}{\hbar}\right)^3}{3!} \operatorname{tr}\left(\hat{\mu}(t_0)\, U_{0,-}(t,t_0)\, T_{\leftarrow}\left(\int_{t_0}^{t} d\tau\, U^{+}_{0,-}(\tau,t_0)\left(H_{1L}(\tau) - H_{1R}(\tau)\right) U_{0,-}(\tau,t_0)\right)^3 \rho_0\right)$$

$$= \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^3 \operatorname{tr}\Big(\hat{\mu}(t_0)\, U_{0,-}(t,t_0) \int_{t_0}^{t} d\tau_3\, U^{+}_{0,-}(\tau_3,t_0)\left(H_{1,L}(\tau_3) - H_{1R}(\tau_3)\right) U_{0,-}(\tau_3,t_0)$$

$$\int_{t_0}^{\tau_3} d\tau_2\, U^{+}_{0,-}(\tau_2,t_0)\left(H_{1L}(\tau_2) - H_{1,R}(\tau_2)\right) U_{0,-}(\tau_2,t_0)$$

$$\int_{t_0}^{\tau_2} d\tau_1\, U^{+}_{0,-}(\tau_1,t_0)\left(H_{1L}(\tau_1) - H_{1,R}(\tau_1)\right) U_{0,-}(\tau_1,t_0)\,\rho_0\Big)$$

$$= \int_{t_0}^{t} d\tau_3 \int_{t_0}^{\tau_3} d\tau_2 \int_{t_0}^{\tau_2} d\tau_1 \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^3 \operatorname{tr}\Big(\hat{\mu}(t_0) \underbrace{U_{0,-}(t,\tau_3)\left(H_{1,L}(\tau_3) - H_{1R}(\tau_3)\right) U_{0,-}(\tau_3,\tau_2)\left(H_{1L}(\tau_2) - H_{1R}(\tau_2)\right) U_{0,-}(\tau_2,\tau_1)\left(H_{1L}(\tau_1) - H_{1R}(\tau_1)\right) U_{0,-}(\tau_1,t_0)\rho_0}_{\text{Mehrzeitige Korrelationsfunktion}}\Big)$$

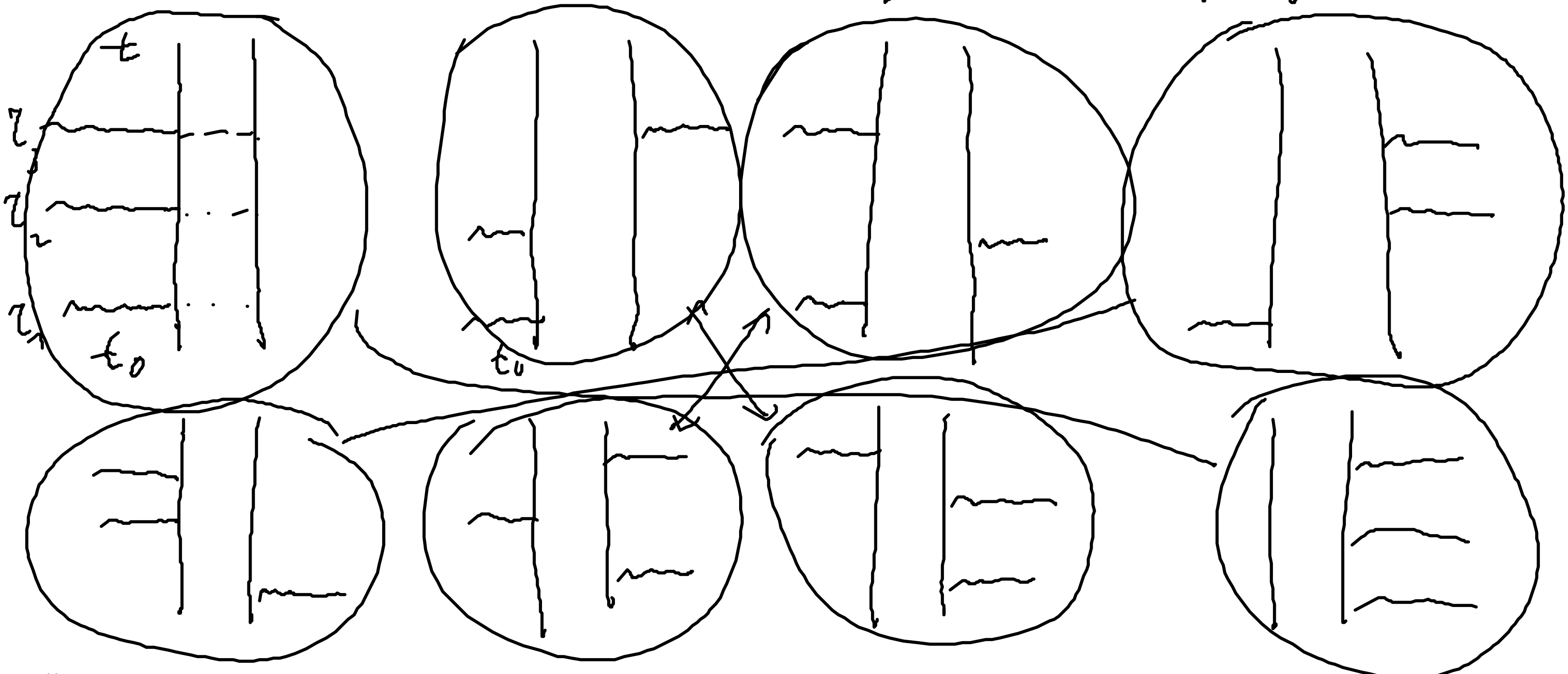
Die 3. Ordnung 4 Zeiten.

Allgemein: $n+1$ Punkt Korrelationsfunktion entsteht bei n Ordnung in der Störung

Diese zu brechen ist Ziel der Diagrammatischen Techniken.

III.2 Entwicklung nach der Störung – erste Diagramme

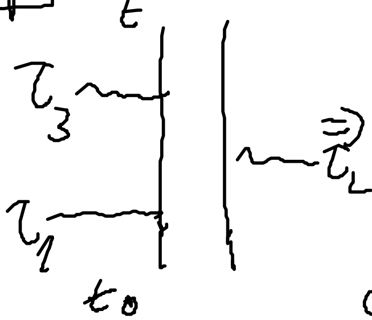
τ ~~| $= H_{1,L}(\tau)$ $\qquad$ τ |~~ $= -H_{1,R}(\tau)$



<u>Regeln</u>

1) Soviel WW wie Ordnung wie Ordnung der WW
2) |~~ gibt (-1), also Anzahl n von |~~ gibt Vorfaktor $(-1)^n$
   (folgt aus $(H_{1L}(\tau_2) - H_{1R}(\tau_2))$)
3) Bei Ausdruck für n-te Ordnung Vorfaktor $\left(-\frac{i}{\hbar}\right)^n$
4) Aus $\overset{t_2}{\underset{t_1}{||}}$ wird $U_{0,-}(t_2, t_1)$
5) Aus unten nach oben wird vorangehen in der Zeit

<u>Bsp</u>:



$$\Rightarrow -\left(-\frac{i}{\hbar}\right)^3 U_0(t,\tau_3) H_{1,L}(\tau_3) U_{0,-}(\tau_3,\tau_2) H_{1,R}(\tau_2) U_{0,-}(\tau_2,\tau_1) H_{1,L}(\tau_1) U_{0,-}(\tau_1,t_0)$$

ok,

$$\rho^{(3)}(t) = \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^3 \mathrm{tr}\left(\hat{\rho}(t_0) \;\ldots\ldots\ldots\right)$$

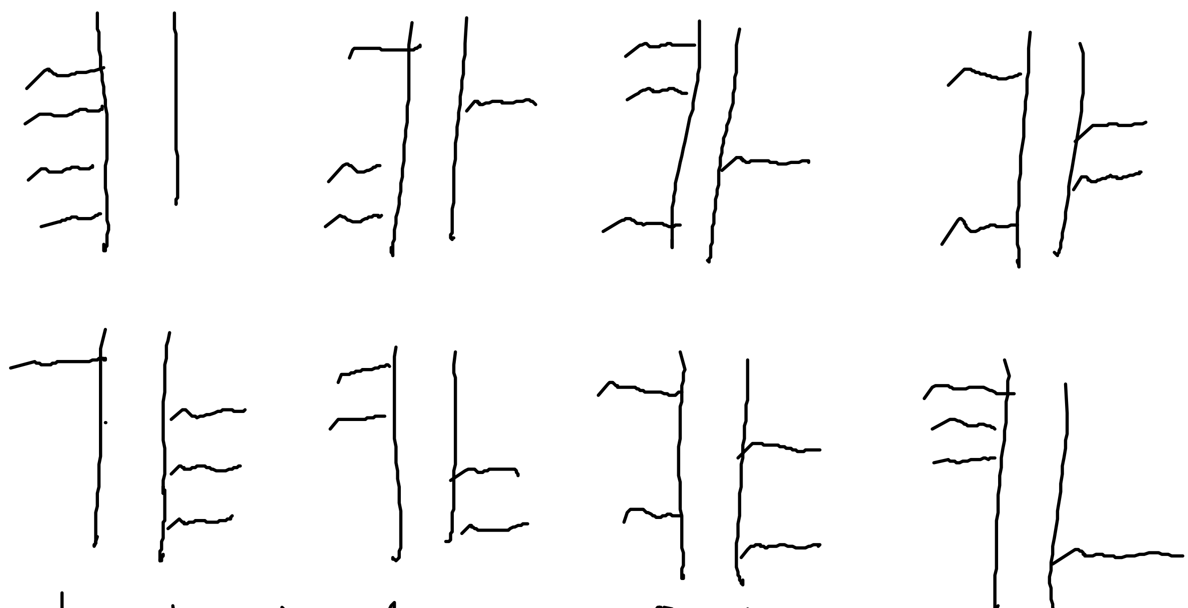
Erinnerung

$$\mathrm{tr}(\hat{N} A) = \mathrm{tr}(\hat{N}_L A) = \mathrm{tr}(\hat{N}_R A)$$

Für die Observable gilt, wir dürfen uns aussuchen ob diese links oder rechts wirkt!
(Später kann man auch aussuchen ob Emission oder Absorption ist)

z.B. Wir wählen links für Observable! (Konvention)

Diagramme



Wir brauchen Auswahl Regeln! Wir müssen die WW und Zeitentwicklung in E-Zuständen von H_0 ausdrücken.

III.3 Darstellung mittels Greenfkt

Matrixdarstellung von Superoperatoren

$$\mathcal{A}\, |n\rangle\langle m| = \sum_{kl} A_{kl,nm}\, |k\rangle\langle l|$$

Vorschrift um $A_{kl,nm}$ zu bestimmen

Einfachster Fall: U_0 wird komplett durch H_0 elektronisch bestimmt. Die Zustände $|n\rangle\langle m|$

seien Eigenzustände des H_0.

Bemerkung In U_0 kann auch die Relaxation des Systems über ext. Bad enthalten sein, s. V

$U_{2,0}(t_3, t_2)$ kann umgeschrieben werden (im Falle $t_3 > t_2$) da H_0 zeitunabhängig ist gilt

$$U_{0,-}(t_3, t_2) = U_{0,-}\underbrace{(t_3 - t_2)}$$

retardierte Greenfkt ist: Hängt von Differenz nur ab.

$$\mathcal{G}_{ret}(t_3 - t_2) = \Theta(t_3 - t_2)\, U_{0,-}(t_3 - t_2)$$

avancierte Greenfkt ist

$$\mathcal{G}_{ave}(t_3 - t_2) = \Theta(t_2 - t_3)\, U_{0,-}(t_3 - t_2)$$

Also $t_3 \downarrow t_2$ $\Leftrightarrow$ $\mathcal{G}(t_3 - t_2) \in$ retardierte

Auch wichtig für Grundzustand muß gelten ($\rho(t_0)$)

$$\mathcal{G}(t_3)\, \rho(t_0) = \rho(t_0) \quad \text{für alle } t_3 > 0.$$

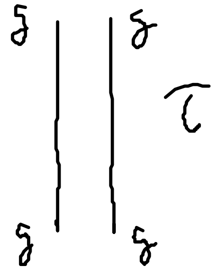
Unser Startpunkt ist

$$\rho_0 = \sum_n p_n |n\rangle\langle n| \qquad \text{(in der Regel ist nur ein } p_n \neq 0 \text{ für } \rho_0\text{)}$$

↑ Eigenvektor von U_0

Wenn nicht nur ein Grundzustand, so müssen Quantenpfade mit p_n gewichtet werden.

Jeder Quantenpfad beginnt mit einem diagonalen Zustand:



$$\Longrightarrow \quad \mathcal{G}_{gg,gg}(\tau)$$

Betrachte

$$\mathcal{G}(\tau)\,|n\rangle\langle m| = \Theta(\tau)\,\underbrace{U_{0,-}(\tau)}_{\exp\left(-\frac{i}{\hbar}\underbrace{H_{0,-}}_{(H_{0,L}-H_{0,R})}\tau\right)}\,|n\rangle\langle m|$$

$$= \Theta(\tau)\,\underbrace{\exp\left(-\frac{i}{\hbar}H_0\tau\right)}_{e^{-i\varepsilon_n\tau}}|n\rangle\langle m|\,\underbrace{\exp\left(\frac{i}{\hbar}H_0\tau\right)}_{e^{i\varepsilon_m\tau}}$$

$$= \Theta(\tau)\,|n\rangle\langle m|\,e^{-i(\varepsilon_n-\varepsilon_m)\tau}$$

Also $(\mathcal{G}(\tau))_{kl,nm} = \delta_{nk}\,\delta_{ml}\,\Theta(\tau)\,e^{-i(\varepsilon_n-\varepsilon_m)\tau}$

falls H_0 nur Eigen. Zustände hat und $\{|n\rangle\}$ ONB.