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. in Fourierraum.

III.1 Mehrzeitige Korrelationsfunktionen

Ziel: Observable berechnen (QM)

Beispiel: Optik

Observable beeinflußt über Lichtfeld, geht in Polarisation P 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.

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

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

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

<u>n-te Ordnung</u>

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

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

Wichtig! Zeitordnung auf beiden Seiten der Dichtematrix zusammen

Zwischen zwei Wechselwirkungen propagiert das System mit U_0

<u>Bsp</u> Ausdruck in 3. Ordnung

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

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

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

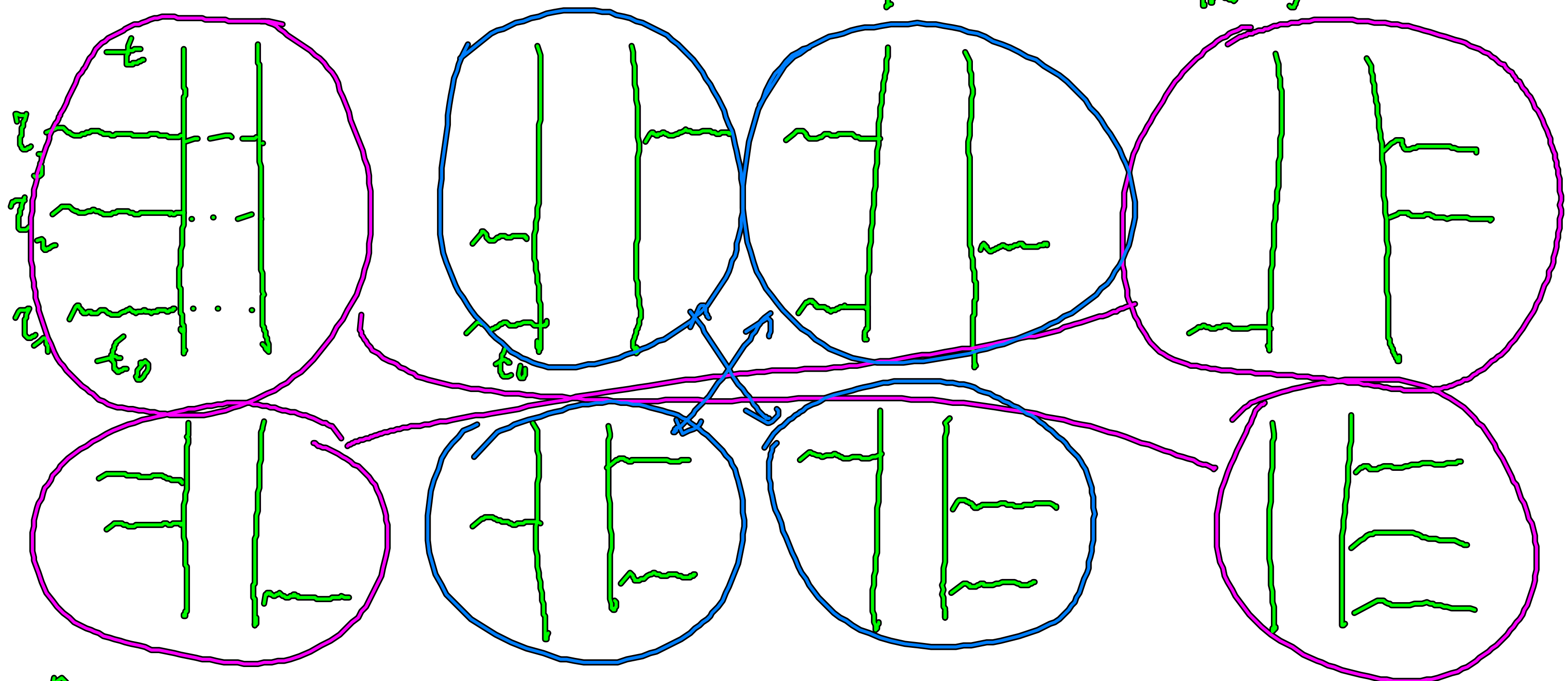
Der 3. Ordnung 4 Zeiten.

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

Diese zu berechnen ist Ziel der Diagrammtechniken.

III.2 Entwicklung nach der Störung – erste Diagramme

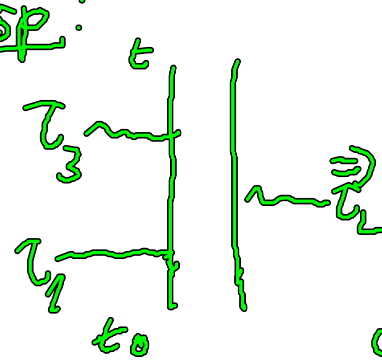
τ ~~| $= H_{1,L}(\tau)$ $\quad \tau$ |~~ $= -H_{1,R}(\tau)$



<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 $\begin{matrix} t_2 \\ \| \\ t_1 \end{matrix}$ wird $U_{0,-}(t_2, t_1)$
5) Aus unten nach oben wird vorangehen in der Zeit

<u>Bsp</u>:



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

ok,

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

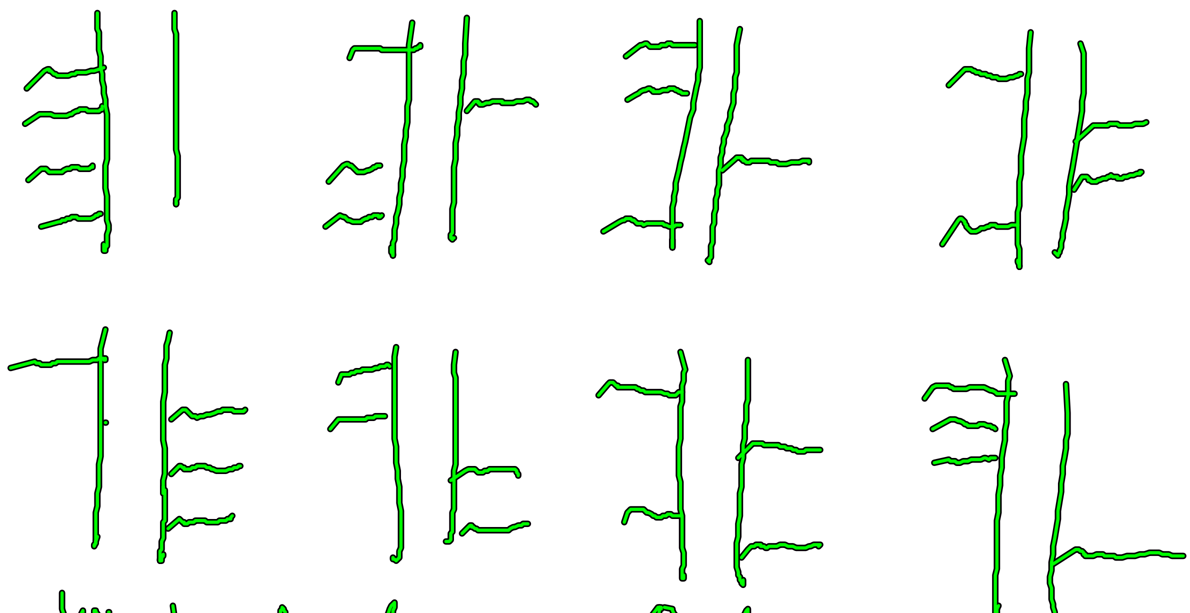
Erinnerung

$$\mathrm{tr}(\hat N A) = \mathrm{tr}(\hat N_L A) = \mathrm{tr}(\hat N_R A)$$

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

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

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

Einfachster Fall: U_0 wird komplett durch H_0 Elektronen 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

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

Hängt von Differenz nur ab.

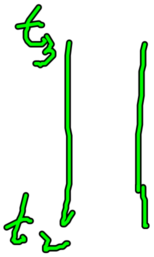
retardierte Greenfkt ist:

$$G_{ret}(t_3-t_2) = \Theta(t_3-t_2)\, U_{0,-}(t_3-t_2)$$

avancierte Greenfkt ist

$$G_{av}(t_3-t_2) = \Theta(t_2-t_3)\, U_{0,-}(t_3-t_2)$$

Also



$\Rightarrow \quad g(t_3-t_2) \in$ retardierte

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

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

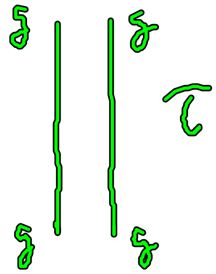
Unser Startpunkt ist

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

↑ Eigenvektoren von U_0

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

Jeder Quantenpfad beginnt mit einem diagonalen Zustand:



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

Betrachte

$$\mathcal{G}(\tau)\,|n\rangle\langle m| = \Theta(\tau)\,\underbrace{U_{0,-}(\tau)}_{\exp\left(-\frac{i}{\hbar}\underbrace{H_{1,-}}_{(H_{0,k}-H_{0,l})}\tau\right)}\,|n\rangle\langle m|$$

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

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

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.