$$(g(t))_{kl,nm} = \delta_{nk}\,\delta_{ml}\,\theta(t)\,e^{-i(\varepsilon_n-\varepsilon_m)t}$$

Wie verhält sich unsere Störung?

$$H_{1,L}(t)\,|n\rangle\langle m| = H_1(t)|n\rangle\langle m| = \sum_k (H_1(t))_{kn}\,|k\rangle\langle m|$$

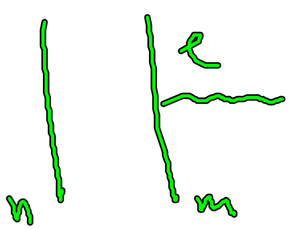
$$\Rightarrow (H_{1,L}(t))_{kl,nm} = \delta_{lm}\,(H_1(t))_{kn}$$

Also $H_{1,L}$ verändert nur die linke Seite!

Also

$$\hat{=} \quad (H_1(t))_{kn}$$

$$H_{1,R}(t)\,|n\rangle\langle m| = |n\rangle\langle m|\,H_1(t) = \sum_l |n\rangle\langle l|\,(H_1(t))_{ml}$$

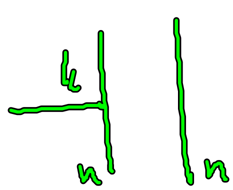


$$\hat{=} \quad -(H_1(t))_{ml}$$

Für unsere WW in Dipolkopplung gilt dann:

links

$$E(t)\cdot(\mu_L(t))_{kl,nm} = \delta_{lm}\,E(t)\cdot(\mu(t))_{kn}$$



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

rechts:

$$E(t)\cdot(\mu_R(t))_{kl,nm} = \delta_{kn}\,(\mu(t))_{ml}\cdot E(t)$$

$$\Big|_{n} \Big|_{m}^{e} \; \hat{=}\; E(t)\cdot(\mu(t))_{me}$$

Es folgt die Spur:

$$\mathrm{tr}\big(\mu_{R/L}\,\ldots\ldots\ldots\;\rho_0\big)$$

↑ string + Propagator

Was macht die Spur am Ende?

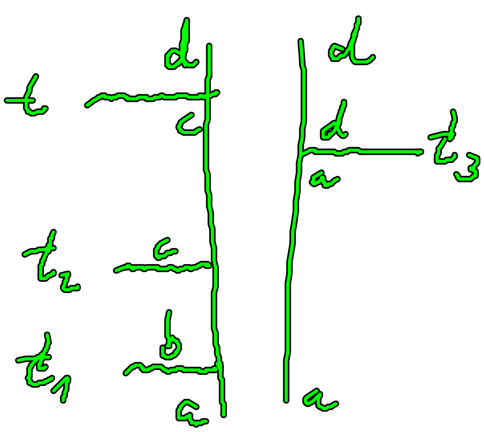
$$\mathrm{tr}(\ldots\ldots) = \sum_k \langle k|\ldots|k\rangle$$

Auf $|n\rangle\langle m|$

$$\mathrm{tr}(|n\rangle\langle m|) = \sum_k \underbrace{\langle k|n\rangle}_{\delta_{kn}} \underbrace{\langle m|k\rangle}_{\delta_{mk}} = \delta_{nm}$$

Am Ende müssen beide Zustände gleich sein!

Folgendes Diagramm als Bsp:



Bedingung Dichtematrix im Gleichgewicht also Diagonal

Aufschreiben der Formel

$$P^{(3)}(t)\Big|_{\text{Beispiel}} = -\left(-\frac{i}{\hbar}\right)^3 \int_{t_0}^{t} dt_3 \int_{t_0}^{t_3} dt_2 \int_{t_0}^{t_2} dt_1$$

$$\sum_a \rho_{aa}\,\mu_{dc}(t)\, \mathcal{G}_{dd}(t-t_3)\, H_{1,da}(t_3)\, \mathcal{G}_{ca}(t_3-t_2)\, H_{1,cb}(t_2)\, \mathcal{G}_{ba}(t_2-t_1)\, H_{1,ba}(t_1)$$

von unten nach oben aufschreiben

Verwende Ausdrücke für Gesamt(t):

$$= -\left(-\frac{i}{\hbar}\right)^3 \int_{t_0}^{t} dt_3 \int_{t_0}^{t_3} dt_2 \int_{t_0}^{t_2} dt_1 \sum_{abcd} N_{cd}(t)\, H_{1da}(t_3)\, H_{1cb}(t_2)\, H_{1ba}(t_1)$$

$$e^{-i(\varepsilon_c-\varepsilon_d)(t-t_3)}\, e^{-i(\varepsilon_c-\varepsilon_a)(t_3-t_2)}\, e^{-i(\varepsilon_b-\varepsilon_a)(t_2-t_1)}$$

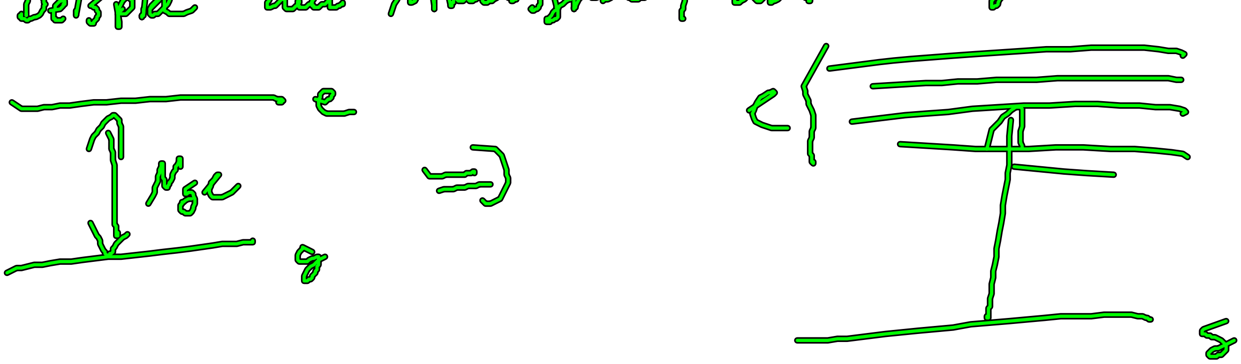
Nächster Abschnitt:
Dipolauswahlregeln und Energieerhaltung zur Reduktion der Diagramme verwenden.

III.4 Regeln aufstellen für Diagramme

Ziel: Eigenschaften des Hamiltonoperators nutzen um Anzahl der Diagramme zu reduzieren!

a) Dipolauswahlregeln (Zweiniveausystem)
b) Rotating Wave Approximation (Energieerhaltung)
c) weitere Beispiele für Spektroskopie
d) Unterteilen in Äste als Analysemöglichkeit

a) Beispiel Zwei Niveausystem / Zwei Bandsystem



e: 1st single exciton: einfache Anregung.

Hamiltonoperator:

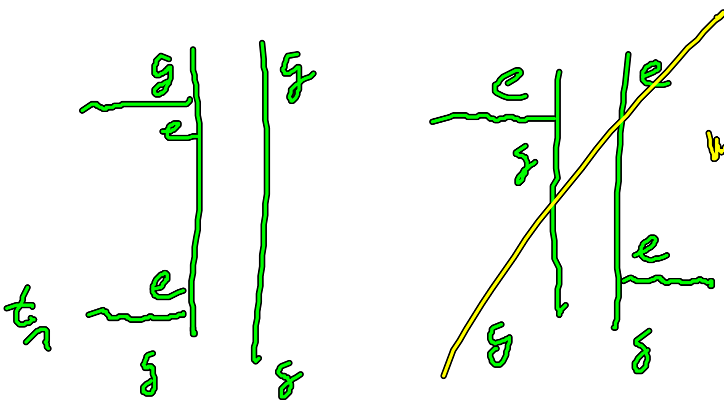
$$H_1 = \sum_e E(t)\,\mu_{ge}\,|g\rangle\langle e| + \underbrace{\sum_e E(t)\,\mu_{eg}\,|e\rangle\langle g|}_{\text{hier könnte man h.c. schreiben}}$$

Observable:

$$P(t) = \mu_{ge}\,\mathrm{tr}(|g\rangle\langle e|\rho) + \underbrace{\mu_{eg}\,\mathrm{tr}(|e\rangle\langle g|\rho)}_{\text{komplex konjugiert}}$$

Es reicht dies zu berechnen, spart 50% der Diagramme.

Diagramme 1. Ordnung (Konvention: Observable links)



weil komplex konjugiert

$$P^{(1)}(t) = \int_{t_0}^{t} \underset{\text{keine}}{dt_1} \left(-\frac{i}{\hbar}\right) \sum_e \mu_{ge}\,\mu_{eg}\cdot E(t_1)\, e^{-i(\omega_e-\omega_g)t_1 - \gamma_{eg} t_1}$$

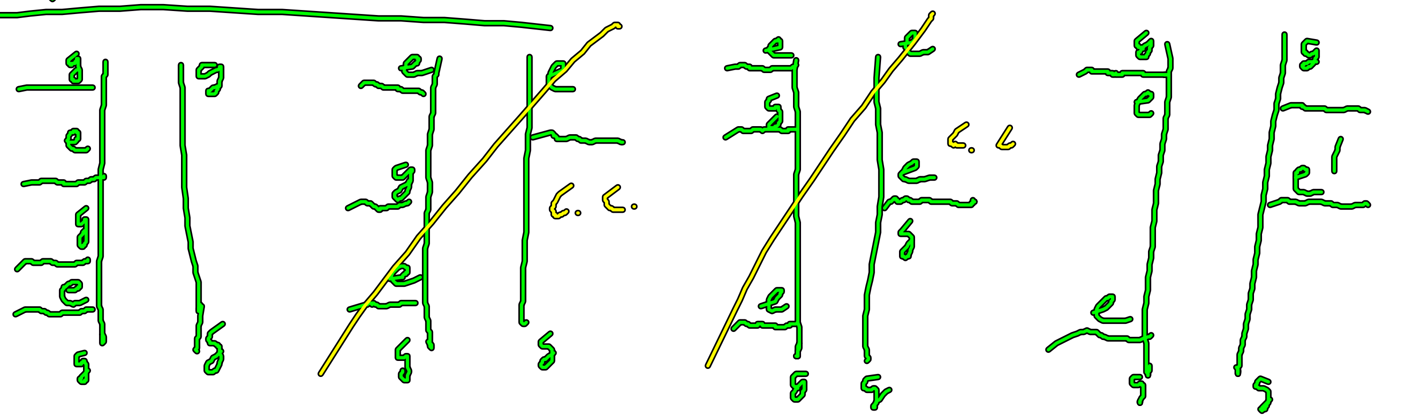
z.B. Umgebungseffekte phänomenologisch

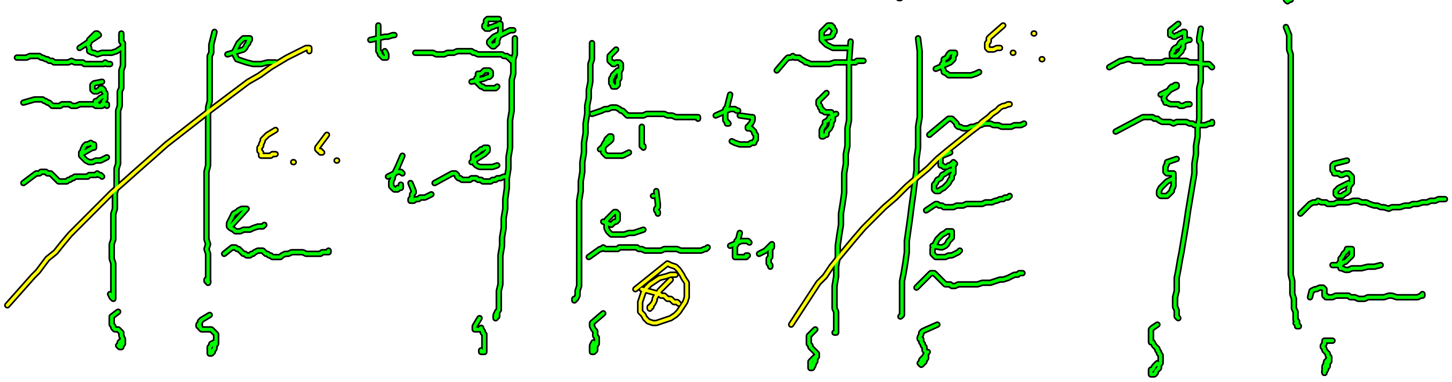
$+ \; c.c.$

Diagramme 2. Ordnung

= 0 (kein Diagramm)   Fertig! (Außer es gebe Dipolmomente N_{gg} oder $N_{ee'}$)

Diagramme 3. Ordnung





Also wir haben 4. Diagramme.

Am Observablen weiter hindrehen...

Beispiel für Response von ⊗

$$\rho^{(3)}(t)\Big|_{\otimes} = \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^3 \sum_{ee'} \int_{t_0}^{t} dt_3 \int_{t_0}^{t_3} dt_2 \int_{t_0}^{t_2} dt_1 \, \mu_{ge}\,\mu_{ge'}(t_1)\cdot E(t_1)\, \mu_{eg}(t_2)\cdot E(t_2)\, \mu_{e'g}(t_3)\cdot E(t_3)\; \delta_{eg}(t-t_3)\, \delta_{ee'}(t_3-t_2)\, \delta_{ge'}(t_2-t_1)$$

kein Vorzeichen

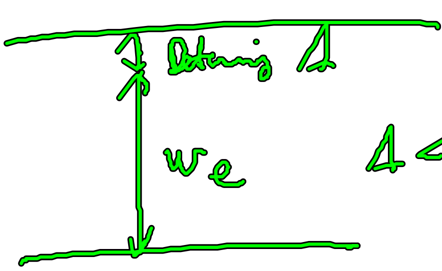
$$= \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^3 \sum_{ee'} \int_{t_0}^{t} dt_3 \int_{t_0}^{t_3} dt_2 \int_{t_0}^{t_2} dt_1 \, \mu_{ge}\,\mu_{ge'}(t_1)\cdot E(t_1)\, \mu_{eg}(t_2)\cdot E(t_2)\, \mu_{e'g}(t_3)\cdot E(t_3)$$

$$e^{-i(\omega_e-\omega_g)(t-t_3)-\gamma_{eg}(t-t_3)}\; e^{-i(\omega_e-\omega_{e'})(t_3-t_2)-\gamma_{ee'}(t_3-t_2)}\; e^{-i(\omega_g-\omega_{e'})(t_2-t_1)-\gamma_{ge'}(t_2-t_1)}$$

Rotating wave approximation / Drehwellennäherung

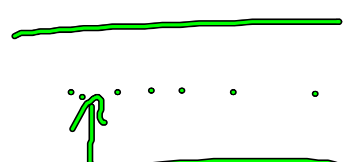
Bei resonanter Anregung optischer Übergänge wird meist die RWA Näherung durchgeführt. Diese vernachlässigt stark offresonante Prozesse.

Beispiel:



$\Delta \ll \omega_e$

Nicht bei stark offresonanten Prozessen



Dann keine RWA!

Nicht bei Zweiphotonenabsorption: (z.B. Second Harmonic Generation)

Kein RWA erlaubt, da die sonst weggenähert wird, das einzelne Photon ist stark offresonant.

Hier Energie im gesamten Prozesse erhalten nicht im einzelnen!

Raman Prozess (offresonant)

Hier darf man offresonante Prozesse nicht vernachlässigen!

Zur Vorbereitung Rotating frame definieren:

$$E(t) = \hat{E}(t)\, e^{i\omega_e t} + \hat{E}^*(t)\, e^{-i\omega_e t}$$

Der Hamiltonoperator hat die Form: $\omega_{ij} = \omega_i - \omega_j$

Bsp:
$$H_1(t) = \sum_e \cancel{\hat{E}(t)\, \mu_{ge}\, e^{i\omega_e t - i\omega_{ge} t}}\, |g\rangle\langle e|$$

$$+ \sum_e \hat{E}^*(t) \cdot \cancel{\mu_g}\; e^{\cancel{-i\omega_e t} - i\omega_{ge} t}\, |g\rangle\langle e| \qquad \text{RWA}$$

$\omega_{ge} \leftarrow$ ~~rotat. schnell~~ ~~⇒ ...~~

$$+ \sum_e \hat{E}(t) \cdot \mu_{eg}\, e^{i\omega_e t - i\omega_{eg} t}\, |e\rangle\langle g|$$

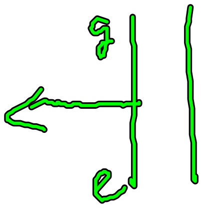
$$+ \sum_e \cancel{\hat{E}^*(t)\, \mu_{eg}\, e^{-i\omega_e t - i\omega_{eg} t}}\, |e\rangle\langle g|$$

RWA

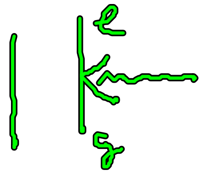
$$= \sum_e \hat{E}(t) \cdot \mu_{ge}\, e^{i(\omega_e - \omega_{eg})t}\, |g\rangle\langle e| \quad (A)$$

$$+ \sum_e \hat{E}^*(t) \cdot \mu_{eg}\, e^{i(\omega_{eg} - \omega_e)t}\, |e\rangle\langle g| \quad (B)$$

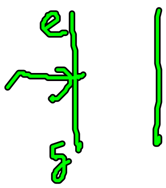
E-Feld Term



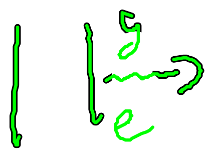
$\leftsquigarrow$ Emission $= e^{i\omega_e t}\, \hat{E}(t)$ (A)



$\leftsquigarrow$ Absorption $= e^{i\omega_e t}\, \hat{E}(t)$



$\rightsquigarrow$ Absorption $\hat{=}\ e^{-i\omega_e t}\, \hat{E}^*(t)$



$\rightsquigarrow$ Emission $\hat{=}\ e^{-i\omega_e t}\, \hat{E}^*(t)$