3.2.4 Zeitabhängige Störungen – Mastergleichung, Fermis-Goldene Regel und all das ...

Die Störung $\underline{V}$ sei zeitabhängig $\underline{V} = \underline{V}(t)$

$$i\hbar \dot{c}_m = \varepsilon_m c_m + \sum_k c_k V_{mk}(t) \qquad V_{mk} = \langle m | \underline{V}(t) | k \rangle$$

z.B. $\underline{V} = -q\vec{r} \cdot \vec{E}(t)$ oder ähnliches

betrachten den Erwartungswert v. Observablen

$$\langle \psi | \underline{O} | \psi \rangle = \sum_{n,m} c_n^*(t) c_m(t) \langle n | \underline{O} | m \rangle$$

$$|\psi(t)\rangle = \sum_n c_n(t) |n\rangle \quad , \quad H_0 |n\rangle = \varepsilon_n |n\rangle$$

neue Größe: $\rho_{nm}(t) = c_n^*(t) c_m(t) \rightarrow$ zu bestimmen um Observable zu berechnen.

(Analogie zur sogenannten Dichtematrix)

$\rho_{nn} \rightarrow$ Wahrscheinlichkeit System im Zustand $|n\rangle$ zu finden

ρ_{nm} $(n \neq m) \longrightarrow$ Wahrscheinlichkeitsamplitude f. Übergänge $n \longleftrightarrow m$.

Gleichung f. ρ_{nm}:

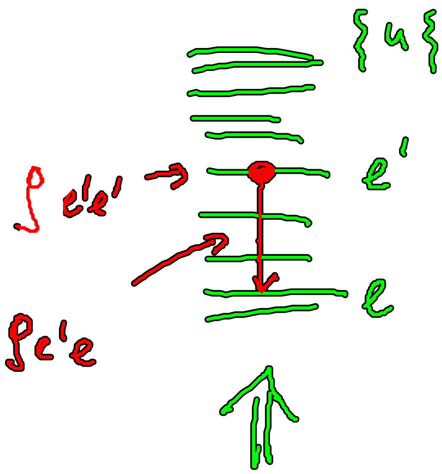
$$\dot{c}_n^* = i\omega_n c_n^* + i \sum_k c_k^* \Omega_{nk}^* \quad , \quad \Omega_{nk} = \frac{V_{nk}}{\hbar}$$

$$\dot{c}_m = -i\omega_m c_m - i \sum_k c_k \Omega_{mk}$$

erste Gleichg. mit $\cdot\, c_m$, zweite Gleichg. mit c_n^* multiplizieren und addieren:

$$d_t \rho_{nm} = i(\omega_n - \omega_m)\rho_{nm} + i \sum_k \left(\rho_{km}\Omega_{kn} - \rho_{nk}\Omega_{mk}\right)$$

Gleichungen f. allgemeines Quantensystem unter Störg. $\underline{V}(t)$



gekoppelte System f. Besetzungen $(e=e')$ und Übergänge $(e\to e')$

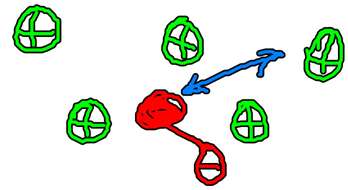
$\Longrightarrow$ Observablen

$\underline{V} = \underline{V}(t)$

→ externe Feld, Absorptionsmessg. von außen

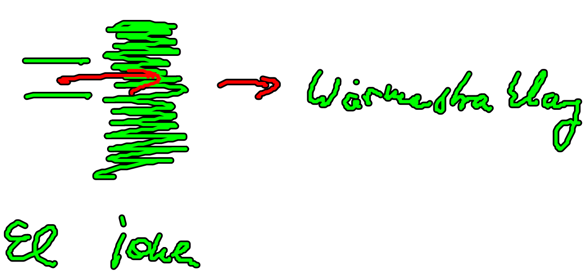
→ Umgebung die mit $\underline{V}(t)$ als stochastische Größe System beeinflußt

Bsp. Atom mit elektron. Übergängen im Festkörper



Kopplg. Elektronen- an die Ionenschwingg.

Anwendung: Dissipation elektronischer Energie → Wärme



Umgebung kann Quantenfeld sein (Photonen, Phononen)

Grenzfälle der ρ_{nm} - Dynamik :

- volle Lösung aller ρ_{nm} ($n \neq m$ und $n = m$)
  $\longrightarrow$ Energieerhaltungssatz kann f. kurze Zeiten verletzt werden. (sehen wir ...)

- man versucht die QM loszuwerden und nur die „einigermaßen" anschauliche Größe $\rho_{n=m} = \rho_{nn}$ zu behalten.
  $\longrightarrow$ E-Satz gilt und dieses Gleichungssystem heißt „Mastergleichung" oder „Ratengleichungen"

gilt nur : externe Störg. schwach : Ω_{nm}

$$\Omega_{nm} \cdot t_{\text{charakteristische}} \ll 1$$

3.2.4.1. Mastergleichungen : Versuch Reduktion auf $\rho_{\ell\ell}$!

$n = m = \ell$

$$d_t \rho_{ee} = i \sum_k \left(\underset{\delta_{ke}\rho_e}{\rho_{ke}} \Omega_{ke} - \underset{\delta_{ke}\rho_e}{\rho_{ek}} \Omega_{ek} \right) = 0$$

naiv! schlecht

Gleichung f. Besetzg. des e-ten Zustands

was ist die Dynamik

ist zuviel genähert, $\rho_{ke}(t)$ besser anschauen:

$$d_t \rho_{ke} = i(\omega_k - \omega_e)\rho_{ke} + i \sum_n \left(\rho_{ne}\Omega_{nk} - \rho_{kn}\Omega_{ek} \right)$$

$$\rho_{ke}(t) = i \sum_n \int_{-\infty}^{t} dt' \, e^{i(\omega_k - \omega_e)(t-t')} \left(\rho_{ne}(t')\Omega_{nk}(t') - \rho_{kn}(t')\Omega_{ek}(t') \right)$$

$\underline{V}(t)$ wird bei $-\infty$ angeschaltet, $s = t - t'$ Koordinate

$$= i \sum_n \int_0^{\infty} ds \, e^{i(\omega_k - \omega_e)s} \left(\rho_{ne}(t-s)\Omega_{nk}(t-s) - \dots \right)$$

$$= i \sum_{n} \int_0^{\infty} ds \, e^{i(\omega_k - \omega_e)s} \underbrace{e^{i(\omega_n - \omega_e)(t-s)}}_{\text{freie Lösung}} \underbrace{\tilde{\rho}_{ne}(t-s)}_{\text{Korrektur}} e^{-i\omega(t-s)} \tilde{\Omega}_{nk}(t-s) \underbrace{- \dots)}$$

ω

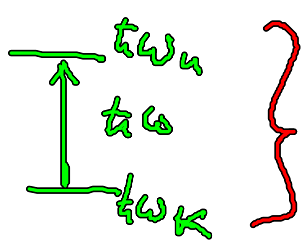
Oszillierende Störung mit Frequenz ω

$$= i \sum_{n,\omega} \left(\int_0^\infty ds\, e^{i(\omega+\omega_k-\omega_n)s}\, \tilde{\rho}_{nk}(t-\cancel{s})\, e^{i(\omega_n-\omega_k)t}\, e^{-i\omega t}\, \tilde{\Omega}_{nk}(t-\cancel{s}) - \dots \right)$$

schwache Störung, ρ_{nk} auf Skala von $e^{i\dots s}$ langsam

$$\dot{\rho}_{kk} = i \sum_{n,\omega} \left(\underbrace{\pi\, \delta(\omega+\omega_k-\omega_n)} \rho_{nk}(t) \underbrace{\tilde{\Omega}_{nk}(t)\, e^{-i\omega t}}_{\Omega_{nk}(t)} - \dots \right)$$

Die angelegte Störung mit der Frequenz ω erzeugt Übergänge zwischen Quantenzuständen mit $\omega_n - \omega_k = \omega$



Energieerhaltg.!

Wenn s in $\rho_{nk}(t-s)$ mitgedacht wird sind Quantenübergänge nicht scharf energetisch definiert, der Energiesatz kann auf kurzen Zeitskalen s verletzt werden.

weitere Näherung alle $\rho_{ij} \to \delta_{ij}\rho_{ii}$

(wollen für Mastergleichungen)

$$\rho_{ke}(t) = i\pi \sum_{\omega} \delta(\omega + \omega_k - \omega_e)\, \Omega^{\omega}_{ek}(t)\, (\rho_{ee}(t) - \rho_{kk}(t))$$

$\hookrightarrow \tilde{\Omega}_{ek}(t)\, e^{-i\omega t}$

einsetzen in

$$d_t \rho_{ee} = i \sum_k (\rho_{ke}\Omega_{ke} - \rho_{ek}\Omega_{ek}) \rightarrow 2\,\mathrm{Im}$$

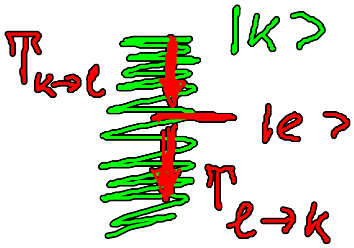
$$d_t \underline{\underline{\rho_{ee}}} = -\sum_k \underbrace{2\pi\, \delta(\omega+\omega_k-\omega_e)\, |\Omega^{\omega}_{ek}(t)|^2}_{\Gamma_{e\to k}}\, \underline{\underline{\rho_{ee}(t)}}$$

$$+ \sum_k \underbrace{2\pi\, \delta(\omega+\omega_k-\omega_e)\, |\Omega^{\omega}_{ek}(t)|^2}_{\Gamma_{k\to e}}\, \rho_{kk}(t)$$

$$\boxed{\dot{\rho}_{ee} = -\sum_k \Gamma_{e\to k}\, \rho_{ee} + \sum_k \Gamma_{k\to e}\, \rho_{kk}}$$

Bemerkungen

a) Die Besetzungswahrscheinlichkeit eines herausgegriffenen Zustands aus dem System wird durch Störung verändert mit der Rate Γ (1/Zeit).



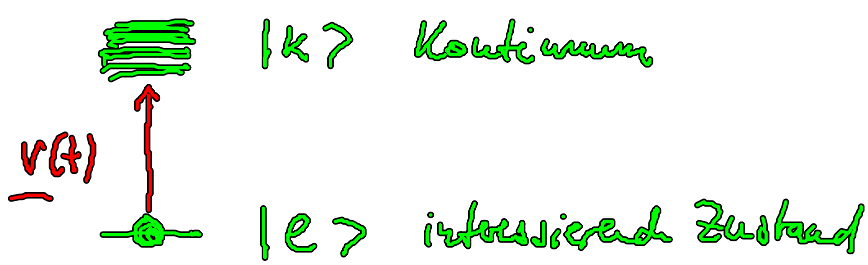
Es existieren Ein- und Ausstreuprozesse.

b) Solche Gleichungen mit der Rate Γ werden Ratengleichungen / Mastergleichungen genannt.

c) wenn V eine klassische Störung (kein Quantenfeld) dann $\Gamma_{e\to k} = \Gamma_{k\to e}$.

3.2.4. 2. Fermis Goldene Regel

Stellen uns vor:



Setzen: in $\dot{\rho}_{ee} = -\sum_k \Gamma_{e\to k} \underbrace{\rho_{ee}}_{=1} + \sum_k \Gamma_{k\to e} \underbrace{\rho_{kk}}_{=0}$

am Beginn des Prozesses:

$$\dot{\rho}_{ee} = -\sum_k \Gamma_{e\to k}$$

zeitliche Änderung der Besetzung ist durch $\sum_k \Gamma_{e\to k} = \Gamma$

$$\boxed{\Gamma = \frac{2\pi}{\hbar} \sum_{k,\varepsilon} \delta(\varepsilon + \varepsilon_k - \varepsilon_e)\, |\tilde{V}^{\omega}_{ke}(t)|^2}$$

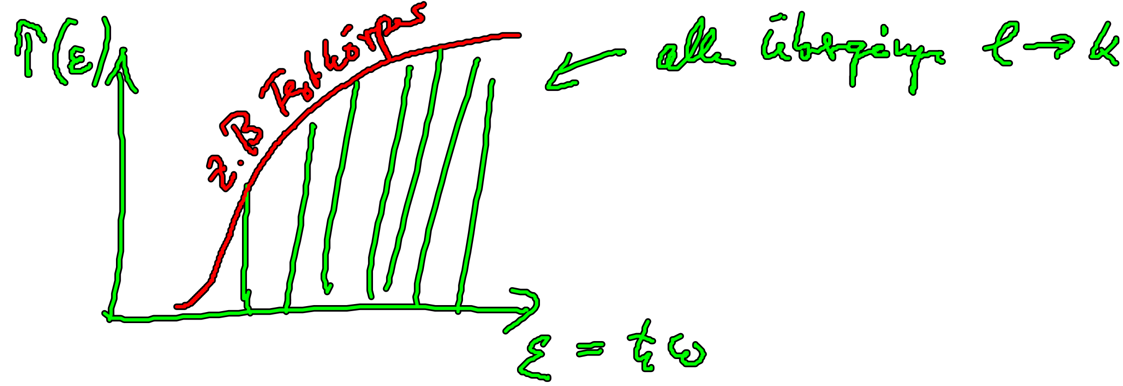
Fermis goldene Regel der Quantenmechanik

$$\delta(\omega) = \delta\left(\frac{\hbar}{\hbar}\omega\right) = \hbar\,\delta(\hbar\omega) = \hbar\,\delta(\varepsilon)$$

$$V \to \Omega\hbar$$

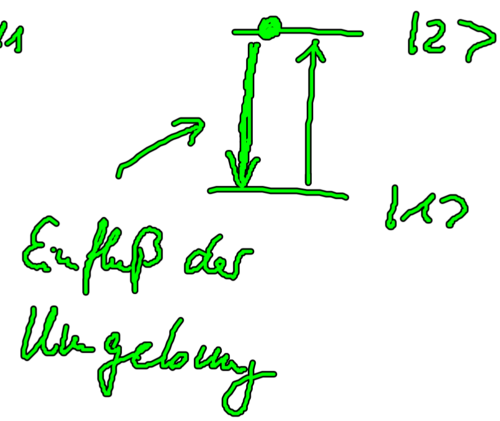
Im Vergleich mit der Absorptionsformel f. ein Zweiniveausystem kann man feststellen:

Γ ist proportional zum Absorptionsprozeß von Energie einer eingestrahlten Störung



3.24.3 Kurze Bemerkung zu ZNS

$$\dot{\rho}_{22} = -\Gamma_{2\to 1}\,\rho_{22} + \Gamma_{1\to 2}\,\rho_{11}$$



$$\underbrace{\rho_{11} + \rho_{22} = 1}$$

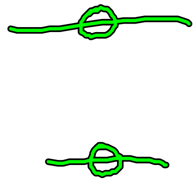
Wahrscheinlichkeitserhaltung

$$\dot{\rho}_{22} = -\Gamma_{2\to 1}\,\rho_{22} + \Gamma_{1\to 2}\,(1-\rho_{22}) \qquad (\Gamma = \Gamma_{1\to 2} = \Gamma_{2\to 1})$$

$$= -2\Gamma\rho_{22} + \Gamma$$

$$= -2\Gamma\left(\rho_{22} - \frac{1}{2}\right)$$

$\longrightarrow$ stationäre Lösung $\rho_{22} = \frac{1}{2}$



$\rho_{22} = \frac{1}{2}$

$\rho_{11} = \frac{1}{2}$

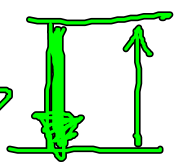
unrealistisch, erwartet:

$0 = \rho_{22}$

$1 = \rho_{11}$

im Grundzustand der durch die Umgebung hergestellt wird

Stärker



wird durch verschiedene Raten erzeugt

$$\dot{\rho}_{22} = -2\Gamma\left(\rho_{22} - \underbrace{\rho_{\text{gleichgewicht}}}_{=0}\right)$$

4.) Zusammenfassung zu Kapitel III

- Um Eigenfunktionen von H_{S-B} $(\vec{l}\cdot\vec{s})$ zu finden, musste der Gesamtdrehimpuls $\vec{j} = \vec{l}\,\hat{1} + \hat{\vec{s}}$ konstruiert werden

Eigenzustände werden mit $|n, l, j, m_j\rangle$ ~~m_l m_s~~

$$E_n \rightarrow E_{nj}$$

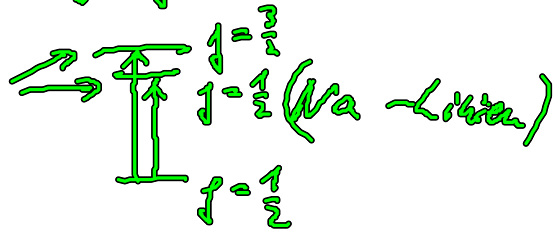
$$J^2 |n, l, j, m_j\rangle = \hbar^2 j(j+1) |n l j m_j\rangle$$

$$J_3 |n, l, j, m_j\rangle = \hbar m_j |n l j m_j\rangle$$

$s = \frac{1}{2}$ (1 Elektron) $j = l \pm \frac{1}{2}$; $m_j = -j \dots +j$

- Spin-Bahn Kopplg. führt zu Dubletts im Spektrum ($l \neq 0$)

$E_n \rightarrow E_{nj}$



- Auswahlregeln f. Übergänge: $\Delta l = \pm 1$, $\Delta m = 0, \pm 1$ (linear, zirkulare Polarisation) $d_{12} \neq 0$!
sollte als Dipolmatrix $\neq 0$ sein

- Verschränkung: 2 Quantensysteme die geschickt präpariert werden zeigen den Verschränkungseffekt, d.h. Ausbildung lässt nicht in 2 Einteilchenzustände faktorisierbaren

Gesamtzustands; Bsp. 2 Spins $|S, M_S\rangle$

S, M_S : Spin und Spin QZ 2er Systeme

$S = 1; 0$, $M_S = 0, \pm 1; 0$

Es existieren 3 Tripletts $(S=1)$, und 1 Singulett $(S=0)$

$\uparrow\downarrow \rightarrow\rightarrow$ $\uparrow\uparrow \downarrow\downarrow$ $\downarrow\uparrow$

Messungen führen zu Paradoxa, EPR - Paradoxon.

- Störungen werden in zeitabhängig und zeitunabhängig unterteilt, man versucht den gestörten Zustand und alten (bekannten) zu entwickeln:

$$|\psi(t)\rangle = \sum_n c_n(t)\,|n\rangle \, , \quad H_0\,|n\rangle = E_n\,|n\rangle$$

Koeffizientgleichungen:

$$\dot{c}_n = -i\omega_n c_n - i \sum_k c_k \Omega_{nk} \, , \quad \Omega_{nk} = \langle n|\frac{V}{\hbar}|k\rangle$$

<u>stationäre Störg:</u> $c_n = e^{-i\frac{E}{\hbar}t}$ Ansatz

→ führt auf Matrix / Determinante zur Bestimmung
von C_n, E → $\{E\}$ Menge der Eigenwerte
sind neue Energien mit Störung

bei Entartung

Diagonalisierung
der Matrix,

<u>ZNS</u>: Aufhebung Entartung
Niveauabstoßung

ohne Entartung

Entwicklung nach $\underline{V}$

1. Ordnung $\Delta E_i = \langle i|\underline{V}|i\rangle$

2. Ordnung !

• <u>zeitabhängige Störung:</u>

wenn die Störung schwach ist und das System auf lange Zeitskalen angesehen wird, so gelten Mastergleichungen die den Umverteilungsprozeß der Besetzungen mit Raten beschreiben:

$$\dot{\rho}_{ll} = -\sum_k \Gamma^{l\to k}\rho_{ll} + \sum_k \Gamma^{k\to l}\rho_{kk}$$

Daraus ergibt sich goldene Regel der QM.

Rabioszillation in ZNS jenseits der Mastregel.

und gutem.