

Sem: Iclunke Theorie am Bsp. eines
Zwei-Niveausystems

Was gibt observable?

$$P(\underline{R}) \propto \sum_{nm} d_{nm} \text{tr}(|m\rangle\langle n| \rho) \quad \text{--- } |2\rangle$$

$$H_0 = \varepsilon_1 |1\rangle\langle 1| + \varepsilon_2 |2\rangle\langle 2| \quad \text{--- } |1\rangle$$

$$H_{int} = E(t) \cdot d_{12} |1\rangle\langle 2| + E(t) \cdot d_{21} |2\rangle\langle 1|$$

$$d_{12} = \langle 1 | \underline{r} \cdot \underline{q} | 2 \rangle$$

Polarisation $d_{12} \text{tr}(|1\rangle\langle 2| \rho) + c.c.$

$$\partial_t \text{tr}(|1\rangle\langle 2| \rho) = \text{tr}(|1\rangle\langle 2| \partial_t \rho) = \text{tr}(|1\rangle\langle 2| \frac{i}{\hbar} [S, H])$$

$$= \text{tr}(|1\rangle\langle 2| \frac{i}{\hbar} [S, H_0]_-) + \text{tr}(|1\rangle\langle 2| \frac{i}{\hbar} [S, H_{int}]_-)$$

$\text{tr}(AB) = \text{tr}(BA)$

$$\left\{ \text{tr}(|1\rangle\langle 2| \frac{i}{\hbar} (\rho (\varepsilon_1 |1\rangle\langle 1| + \varepsilon_2 |2\rangle\langle 2|) - (\varepsilon_1 |1\rangle\langle 1| + \varepsilon_2 |2\rangle\langle 2|) \rho)) \right.$$

$$= \frac{i}{\hbar} (\varepsilon_1 \text{tr}(|1\rangle\langle 2| \rho) - \varepsilon_2 \text{tr}(|1\rangle\langle 2| \rho))$$

$$\left\{ \text{tr}(|1\rangle\langle 2| \frac{i}{\hbar} [S, H_{int}]_-) \right.$$

$$= \frac{i}{\hbar} \text{tr}(|1\rangle\langle 2| \rho (E(t) \cdot d_{12} |1\rangle\langle 2| + E(t) \cdot d_{21} |2\rangle\langle 1|) - |1\rangle\langle 2| (E(t) \cdot d_{12} |1\rangle\langle 2| + E(t) \cdot d_{21} |2\rangle\langle 1|) \rho)$$

$$= \frac{i}{\hbar} E(t) \cdot d_{21} (\text{tr}(|2\rangle\langle 2| \rho) - \text{tr}(|1\rangle\langle 1| \rho))$$

Also: $\frac{d}{dt} \text{tr}(|1\rangle\langle 1| \rho) = \frac{i}{\hbar} (\varepsilon_1 - \varepsilon_2) \text{tr}(|1\rangle\langle 1| \rho)$

$$+ \frac{i}{\hbar} E(t) \cdot d_{21} (\text{tr}(|2\rangle\langle 2| \rho) - \text{tr}(|1\rangle\langle 1| \rho))$$

Analog

$$\frac{d}{dt} \text{tr}(|1\rangle\langle 1| \rho) = 2 \text{Im} \left(\frac{E(t) d_{12}}{\hbar} \text{tr}(|1\rangle\langle 2| \rho) \right)$$

$$\frac{d}{dt} \text{tr}(|2\rangle\langle 2| \rho) = 2 \text{Im} \left(\frac{E(t) d_{21}}{\hbar} \text{tr}(|1\rangle\langle 2| \rho) \right)$$

↙ ↘
|| Block gleichgültig

$\text{tr}(|n\rangle\langle n| \rho)$ wird meist als Dichte (Elektronendichte)

bezeichnet. Geben Sie die Wahrscheinlichkeit an mit der ein Elektron im jeweiligen Zustand $|n\rangle$ ist.
Maß für die Dichte von Elektronen im jew. Zustand.

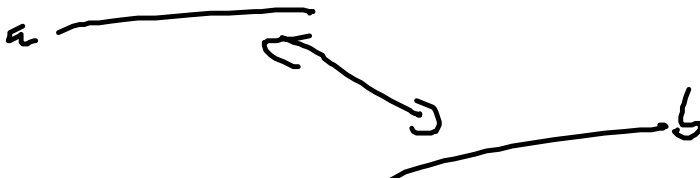
$$\frac{d}{dt} \text{tr}(|n\rangle\langle n| \rho) = \frac{i}{\hbar} (\varepsilon_n - \varepsilon_m) \text{tr}(|n\rangle\langle n| \rho)$$

$$+ \frac{i}{\hbar} \sum_k E(t) \cdot d_{nk} \text{tr}(|k\rangle\langle n| \rho)$$

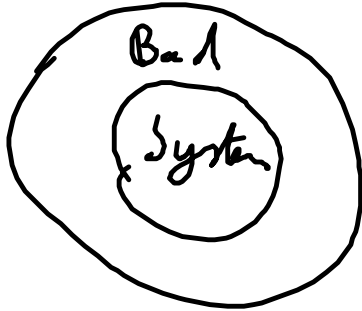
$$- \frac{i}{\hbar} \sum_k E(t) \cdot d_{kn} \text{tr}(|n\rangle\langle k| \rho)$$

II.2. c) Raten-gleichungen

Mehr-Niveausystem



Es findet sich eine Relaxation zum energetisch niedrigeren Niveau statt.



Bei einer Relaxation findet Energieaustausch mit der Umgebung statt. System-Bad WW

Raten können berechnet werden mit "Fermi's golden rule" und Markov Näherung
 lassen sich die Raten herleiten.

$$\partial_t \text{tr}(|a\rangle\langle a| \rho) = - \underbrace{\Gamma^{a \rightarrow b}}_{\text{Reduktion}} \text{tr}(|a\rangle\langle a| \rho) + \underbrace{\Gamma^{b \rightarrow a}}_{\text{Beschreibung}}$$

$$\partial_t \text{tr}(|b\rangle\langle b| \rho) = - \Gamma^{b \rightarrow a} \text{tr}(|b\rangle\langle b| \rho) + \Gamma^{a \rightarrow b} \text{tr}(|a\rangle\langle a| \rho)$$

Die Raten Γ müssen berechnet werden (später)

$$\partial_t (\text{tr}(|a\rangle\langle a| \rho) + \text{tr}(|b\rangle\langle b| \rho)) = 0$$

$$\text{tr}(|a\rangle\langle a| \rho) + \text{tr}(|b\rangle\langle b| \rho) = 1$$

Teilchenzahl muß erhalten werden.

$$\frac{\Gamma_{b \rightarrow a}}{\Gamma_{a \rightarrow b}} = \exp\left(-\frac{(\epsilon_b - \epsilon_a)}{k_B T}\right)$$

Detaillierte Balance

Nach Relaxation, hat das System die Temperatur des Bads T .

$$\partial_t \text{tr}(|n\rangle\langle n| \rho) = - \sum_{n'} \Gamma^{nn'} \text{tr}(|n'\rangle\langle n'| \rho)$$

1) Mit $\frac{|\Gamma^{nn'}|}{|\Gamma^{n'n}|} = \exp(-\hbar(\epsilon_n - \epsilon_{n'})/k_B T)$

2.) $\Gamma_{n'n'} = - \sum_{n''} \Gamma_{n'n''}$

Die Summe der Elemente der Matrix in jeder Spalte ist Null. Die Wahrscheinlichkeit und Teilchenzahl ist erhalten.

Was ist mit nicht diagonalen Anteil der D-Matrix

z. B. $\text{tr}(|n\rangle\langle m| \rho)$:

$$\partial_t \text{tr}(|n\rangle\langle m| \rho) = \frac{i}{\hbar} (\epsilon_n - \epsilon_m) \text{tr}(|n\rangle\langle m| \rho) - \Gamma_{nm, nm} \text{tr}(|n\rangle\langle m| \rho)$$

↖ Dephasing

$$\Gamma_{nm, nm} = \frac{1}{2} (\Gamma_{nm} + \Gamma_{mn}) + \overset{\uparrow}{\Gamma_{nm}}$$

Relaxationprozesse. Pure dephasing
Durch Umgebung Phase verloren.

Warum dürfen die nicht diagonalen schneller zerfallen -
Annahme reiner Zustand $|\psi\rangle = c_a |a\rangle + c_b |b\rangle$

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

$$\langle a|\rho|a\rangle = c_a^* c_a$$

$$\langle b|\rho|b\rangle = c_b^* c_b$$

$$\langle a|\rho|b\rangle = c_a^* c_b$$

$$\| |\langle a|\rho|b\rangle| = \sqrt{\langle a|\rho|a\rangle \langle b|\rho|b\rangle} //$$

$$\partial_t |\langle a|\rho|b\rangle| = \frac{1}{2} (\partial_t \langle a|\rho|a\rangle) \sqrt{\frac{\langle b|\rho|b\rangle}{\langle a|\rho|a\rangle}} + \frac{1}{2} (\partial_t \langle b|\rho|b\rangle) \sqrt{\frac{\langle a|\rho|a\rangle}{\langle b|\rho|b\rangle}}$$

$$= -\frac{1}{2} (\Gamma_{a \rightarrow b} + \Gamma_{b \rightarrow a}) |\langle a|\rho|b\rangle|$$

Gemischter Zustand

$$\sqrt{\langle a|\rho|a\rangle \langle b|\rho|b\rangle} \geq |\langle a|\rho|b\rangle| \quad \text{Schwarz'sche Ungleichung}$$

Störzufall, Pure Dephasing ist Folge des Informations über Umgebung fehlen.

$$\Gamma_{ab,ab} = \frac{1}{T_2} \quad \text{und} \quad \Gamma_{a \rightarrow b} = \frac{1}{T_1}$$