4.4.3. Wechselwirkung eines Atoms mit thermischem Reservoir (Spontane Emission)

- System S (z.B. Atom) wechselwirkt mit Umgebung R
- Umgebung ist ein Reservoir im thermischen Gleichgewicht

Ziel: Entwicklung einer Mastergleichung für reduzierte Dichtematrix des System $\hat{\rho}_S = tr_R\, \hat{\rho}_{SR}$

Vorraussetzung: schwache Kopplung zwischen System & Reservoir
d.h. Reservoir nicht beeinflusst von WW

$$\Rightarrow \hat{\rho}_{SR} = \hat{\rho}_S(t) \otimes \hat{\rho}_R(0) + \hat{\rho}_c(t)$$

$\Rightarrow$ damit $\rho_S = tr_R\, \rho_{SR}$ gilt muss gelten:

$$tr_R\, \rho_c(t) = 0$$

Methode: Dichtematrixansatz im Wechselwirkungsbild

$$\boxed{i\hbar \dot{\hat{\rho}}_{SR}^{\,w} = [\hat{V}, \rho_{SR}^{w}]}$$

$$\hat{V} = e^{\frac{i}{\hbar}\mathcal{H}_0 t}\, \hat{\mathcal{H}}_w\, e^{-\frac{i}{\hbar}\mathcal{H}_0 t}$$

$$\hat{\rho}_{SR}^{w} = e^{\frac{i}{\hbar}\mathcal{H}_0 t}\, \hat{\rho}_{SR}\, e^{-\frac{i}{\hbar}\mathcal{H}_0 t}$$

$$\hat{\mathcal{H}} = \hat{\mathcal{H}}_0 + \hat{\mathcal{H}}_w$$

formelles Integrieren liefert

$$\varrho_{SR}(t) = \varrho_{SR}(0) - \frac{i}{\hbar}\int_0^t [V(t'), \varrho_{SR}(t')]\, dt \qquad (*)$$

$$\overset{(*)}{=} \varrho_{SR}(0) - \frac{i}{\hbar}\int_0^t [V(t'), \varrho_{SR}(0)]\, dt' - \frac{1}{\hbar^2}\left\{\int_0^t dt' \int_0^{t'} dt'' \, [V(t')[V(t''), \varrho_{SR}(t'')]]\right\}$$

- würde Potenzreihe in $\varrho_{SR}(0)$ ergeben

ABER für exponentiellen Zerfall wären viele Iterationen nötig

$\rightarrow$ Abbruch (Störungstheorie 2. Ordnung)

Differentiation nach t

$$(I) \qquad \dot{\varrho}_{SR}(t) = -\frac{i}{\hbar}[V(t), \varrho_{SR}(0)] - \frac{1}{\hbar^2}\int_0^t dt' [V(t), [V(t') \varrho_{SR}(t')]]$$

Annahmen: (1) schwache Kopplung $\quad \varrho_{SR} = \varrho_S(t) \otimes \varrho_R(0) + \varrho_c(t)$

(2) Markov Annahme

- Bad hat viele Freiheitsgrade

also schnelle Dynamik d.h. ich darf $\varrho_S(t') \rightarrow \varrho(t)$ ersetzen

Spurbildung über R

Master Gleichung

$$\boxed{\rightarrow \quad \dot{\varrho}_S(t) = -\frac{i}{\hbar} tr_R [V(t), \varrho_S(0) \times \varrho_R(0)] - \frac{1}{\hbar} tr_R \int_0^t dt' [V(t) [V(t') \varrho_S(t) \times \varrho_R(0)]]}$$

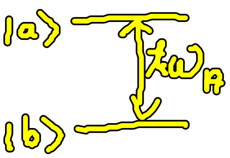
→ DGL 1. der Ordnung in ρ_S

· Kenntnis zum Zeitpunkt $t=0$ reicht
(keine Vergangenheit)

Markov Näherung

· **Bsp.** 2 Niveau System

WW Hamiltonian: $$\hat V(t) = \hbar \sum_{\underset{\text{Moden des Reservoirs}}{k}} g_k \Big[\overset{\text{Photonen Erzeuger}}{\hat b_k^+} \hat\sigma_- e^{-i(\omega_A-\omega_k)t} + \sigma_+ b_k e^{i(\omega_A-\omega_k)t} \Big]$$



$\omega_A - \omega_k = \Delta$

$\sigma_- = |b\rangle\langle a|$

$\sigma_+ = |a\rangle\langle b|$

es gilt $$tr_R\left(\hat b_k^+ \hat\sigma_-, \hat\rho_A \otimes \hat\rho_R\right) = \langle b_k^+\rangle \hat\sigma_- \hat\rho_A$$

(I)
$$\Rightarrow \dot\rho_A = -i \sum_k g_k \langle b_k^+\rangle [\sigma_-, \rho_A] e^{-i\Delta t}$$
$$- \int_0^t dt' \sum_{kk'} g_k g_{k'} \Big\{ [\sigma_-\sigma_-\rho_A(t') - 2\sigma_-\rho_A\sigma_- + \rho_A\sigma_-\sigma_-] \langle b_k^+ b_{k'}^+\rangle \cdot e^{-i\Delta t - i\Delta t'}$$
$$+ [\sigma_-\sigma_+\rho_A - \sigma_+\rho_A\sigma_-] \langle b_k^+ b_{k'}\rangle e^{-i\Delta t + i\Delta t'}$$
$$+ [\sigma_+\sigma_-\rho_A - \sigma_-\rho_A\sigma_+] \langle b_k b_{k'}^+\rangle e^{i\Delta t - i\Delta t'} \Big\} + c.c.$$

da das Bad therm. Reservoir im GG (Bosonen) wissen

wir: $\hat{\rho}_R = \prod_k \dfrac{1 - e^{-\frac{\hbar\omega_k}{kT}}}{e^{\frac{\hbar\omega_k b_k^+ b_k}{kT}}} \leftarrow \frac{1}{Z} e^{-\beta \hat{H}}$

$$\langle n_k \rangle = \bar{n}_k = \frac{1}{e^{\frac{\hbar\omega_k}{kT}} - 1}$$

$$\Rightarrow \quad \langle b_k \rangle = \langle b_k^+ \rangle = 0 = \mathrm{tr}\, \rho_R b_k^+$$

$$\langle b_k^+ b_{k'} \rangle = \bar{n}_k \delta_{kk'}$$

$$\langle b_k b_{k'}^+ \rangle = (n_k + 1)\delta_{kk'}$$

$$\langle b_k b_{k'} \rangle = \langle b_k^+ b_{k'}^+ \rangle = 0$$

$$\Rightarrow \quad \dot{\rho}_A = -\int_0^t dt' \sum_k g_k^2 \Big\{ \overbrace{\left[\sigma_- \sigma_+ \rho_A(t') - \sigma_+ \rho_A(t') \sigma_- \right]}^{A(t')} \bar{n}_k e^{-i\Delta(t-t')}$$
$$+ \underbrace{\left[\sigma_+ \sigma_- \rho_A(t') - \sigma_- \rho_A(t') \sigma_+ \right]}_{B(t')} (n_k + 1) e^{+i\Delta(t-t')} \Big\}$$

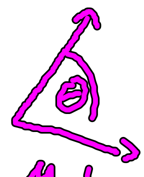
Annahme: kleiner Abstand der Feldmodenfrequenzen

$$\sum_k \longrightarrow 2\frac{V}{(2\pi)^3}\int_0^{2\pi} d\phi \int_0^{\pi} d\vartheta \sin\vartheta \int_0^{\infty} dk\, k^2$$

$$E_k = \sqrt{\frac{\hbar\omega_k}{2\varepsilon_0 V}}$$

$$g_k = -\frac{\mu E_k}{\hbar}$$

$\vec{E}_k$ Feld Polarisation



μ_{ab} Atom Dipolmoment

V: Quantisierungsvolumen

$$g_k^2 = \frac{\omega_k}{2\hbar\varepsilon_0 V}\mu_{ab}^2\cos^2\Theta$$

$$k = \frac{\omega_k}{c}$$

$$\dot{\rho}_A = -\frac{4\mu_{ab}^2}{(2\pi)^2\, 6\hbar\varepsilon_0 c^3}\int_0^{\infty} d\omega_k\, \omega_k^3 \int_0^{t} dt'\, e^{-i(\omega_A-\omega_k)(t-t')} A(t') + e^{i(\omega_A-\omega_k)(t-t')} B(t')$$

Argumentation: ω_k^3 ändert sich wenig in der Nähe von $\omega_k = \omega_A$

$$\int_{-\infty}^{\infty} d\omega_k\, e^{i(\omega_A-\omega_k)(t-t')} = 2\pi\delta(t-t')$$

Annahme schneller Bad-Variablen

$$W = \frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\cdot\frac{4\omega_A^3\mu^2}{3\hbar c^3}$$

(Dämpfungskonstante)

$$\boxed{\Rightarrow \dot{\hat{\rho}}_A = -\bar{n}_{th}\frac{\omega}{2}\left[\sigma_-\sigma_+\hat{\rho}_A(t) - \sigma_+\hat{\rho}_A(t)\sigma_-\right] + (\bar{n}_{th}+1)\frac{\omega}{2}\left[\sigma_+\sigma_-\hat{\rho}_A(t) - \sigma_-\hat{\rho}_A(t)\sigma_+\right] + c.c.}$$

$$\dot{\rho}_{aa} = \langle a | \dot{\rho}_A | a \rangle$$

$$\sigma_+|a\rangle = |a\rangle\langle b|a\rangle = 0$$

$$\sigma_-|a\rangle = |b\rangle$$

$$\dot{\rho}_{aa} = -(\bar{n}_{th}+1)\,\omega\rho_{aa} + \bar{n}_{th}\,\omega\rho_{bb}$$

$$\dot{\rho}_{bb} = \langle b | \dot{\rho}_A | b \rangle$$

$$= -\bar{n}_{th}\,\omega\rho_{bb} + (\bar{n}_{th}+1)\,\omega\rho_{aa}$$

$$\rho_{aa} + \rho_{bb} = 1$$

$$\dot{\rho}_{ab} = -\left(n_{th} + \frac{1}{2}\right)\omega\rho_{ab}$$

$\rightarrow$ DGL System für Einträge der Dichtematrix

Lösung: für AB $\rho_{aa}(0) = 1$, $\rho_{bb}(0) = 0$, $\rho_{ab}(0)$

$$\hat{\rho}_A(t) = \left(\begin{array}{c|c} \frac{n+1}{2n+1} e^{-(2n+1)\omega t} + \frac{n}{2n+1} & e^{-\frac{\omega}{2}t}\rho_{ab}(0) \\ \hline e^{-\frac{\omega}{2}t}\rho_{ba}(0) & 1 - \frac{n}{2n+1} - e^{-(2n+1)\omega t}\cdot\frac{n+1}{2n+1} \end{array}\right)$$

$$\frac{\rho^{ss}_{aa}}{\rho^{ss}_{bb}} = \frac{n}{n+1} = \boxed{e^{-\frac{\hbar\omega_A}{kT}}}$$

Boltzmann Faktor

$$\bar n_{kA} = \bar n_{th} = n = \frac{1}{e^{\frac{\hbar\omega_A}{kT}} - 1}$$

steady state Besetzungen $\rho^{ss}_{aa}, \rho^{ss}_{bb}$

$$\rho^{ss}_{aa} = \frac{n}{2n+1}, \quad \rho^{ss}_{bb} = 1 - \frac{n}{2n+1}$$

→ Ein Atom im Kontakt mit Reservoir der Temp. T hat ein Besetzungsverhältnis der Energieniveaus von

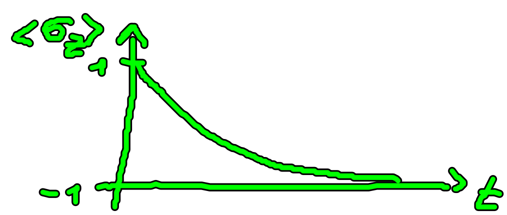
$$\frac{\rho_{aa}}{\rho_{bb}} = e^{-\frac{\hbar\omega_A}{kT}} .$$

• Atom im Vakuum? $\bar n_{th} = 0$

$$\boxed{\begin{aligned} \dot\rho_{aa} &= -\omega\rho_{aa} \\ \dot\rho_{ab} &= -\frac{\omega}{2}\rho_{ab} \\ \dot\rho_{bb} &= \omega\rho_{aa} \end{aligned}}$$

→ das Atom zerfällt beim Kontakt mit Vakuum Photonenmoden

Inversion $\langle\sigma_z\rangle = \mathrm{tr}\,\rho_A(t)\sigma_z = 2e^{-\omega t} - 1$



→ ω^{-1} ist Lebensdauer des angeregten Atomzustandes

Korrelationsfunktionen?

Op. im Heisenberg Bild

Interessant wäre $\langle \hat\sigma^+(t+\tau)\hat\sigma^- \rangle = tr\,\rho\,\sigma^+(t+\tau)\sigma^-$

Problem: wir sind im WW Bild
d.h. σ^+, σ^- haben keine Zeitabhängigkeit mehr

Zeitentwicklungsoperator

Lösung: Rücktransformation

$$\langle \sigma^+(t+\tau)\sigma^-(t)\rangle = tr_A\left\{\sigma^+ V(t+\tau)\sigma^-\hat\rho_A(t)\right\}$$

Überlegung: $\langle\sigma^+\rangle(t) = tr\,\rho(t)\sigma^+$

$\sigma^+ = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$

$$\overset{!}{=} V(t)\langle\sigma^+(0)\rangle$$

Lösung für ρ_A → $= e^{-\frac{\omega}{2}t}\rho_{ab}(0)$

↳ $V(t) = e^{-\frac{\omega}{2}t}$

⇒ d.h. $\boxed{g^{(1)}(t) = e^{-\frac{\omega}{2}t}}$

ergibt Linienbreite des emittierten Lichtes über Wiener Khinchin Theorem

- ähnliches Vorgehen für $g^{(2)}$ (Korrelationsfkt. 2. Ordnung im Feld)

$$\langle \sigma^+(t)\sigma^+(t+\tau)\sigma^-(t)\sigma^-(t+\tau)\rangle$$

...... → $g^{(2)}(t) = 1 - e^{-\omega t}$

$g^{(2)}(0) = 0$ „anti-bunching"

Atom kann nicht sofort ein zweites Photon emittieren wenn schon eins emittiert würde