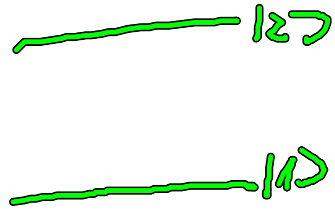
Semi-klassische Theorie am Bsp. eines Zwei-Niveausystems

Was gibt Observablen?

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



$$H_0 = \varepsilon_1 |1\rangle\langle 1| + \varepsilon_2 |2\rangle\langle 2|$$

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

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

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

$$\partial_t\, tr(|1\rangle\langle 2|\rho) = tr(|1\rangle\langle 2|\partial_t\rho) = tr\left(|1\rangle\langle 2| \tfrac{i}{\hbar}[\rho, H]_-\right)$$

$$= \underbrace{tr\left(|1\rangle\langle 2| \tfrac{i}{\hbar}[\rho, H_0]_-\right)} + \underbrace{tr\left(|1\rangle\langle 2| \tfrac{i}{\hbar}[\rho, H_{int}]_-\right)}$$

$tr(AB) = tr(BA)$

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

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

$$tr\left(|1\rangle\langle 2| \tfrac{i}{\hbar}[\rho, H_{int}]_-\right)$$

$$= \frac{i}{\hbar}\, tr\Big(|1\rangle\langle 2|\rho\left(\cancel{E(t)\cdot d_{12}\, |1\rangle\langle 2|} + E(t)\, d_{21}\, |2\rangle\langle 1|\right)$$

$$- |1\rangle\langle 2|\left(\cancel{E(t)\, d_{12}\, |1\rangle\langle 2|} + E(t)\, d_{21}\, |2\rangle\langle 1|\right)\rho\Big)$$

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

<u>Also:</u>

$$\partial_t tr(|1\rangle\langle 2|\rho) = \frac{i}{\hbar} (\varepsilon_1 - \varepsilon_2)\, tr(|1\rangle\langle 2|\rho) + \frac{i}{\hbar} E(t) \cdot d_{21} \left(tr(|2\rangle\langle 2|\rho) - tr(|1\rangle\langle 1|\rho) \right)$$

<u>Analog:</u>

$$\partial_t tr(|1\rangle\langle 1|\rho) = 2\, \mathrm{Im} \left(\frac{E(t) d_{12}}{\hbar} tr(|1\rangle\langle 2|\rho) \right)$$

$$\partial_t tr(|2\rangle\langle 2|\rho) = -2\, \mathrm{Im} \left(\frac{E(t) d_{12}}{\hbar} tr(|1\rangle\langle 2|\rho) \right)$$

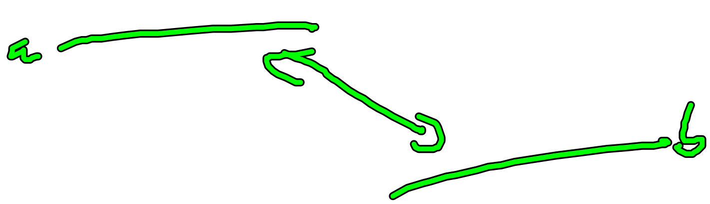
$\Rightarrow$ "Blochgleichungen"

$tr(|n\rangle\langle n|\rho)$ 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.

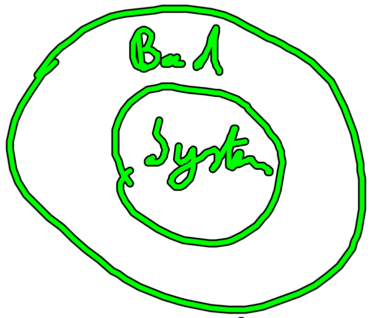
$$\partial_t tr(|n\rangle\langle m|\rho) = \frac{i}{\hbar} (\varepsilon_n - \varepsilon_m)\, tr(|n\rangle\langle m|\rho) + \frac{i}{\hbar} \sum_k E(t) \cdot d_{nk}\, tr(|k\rangle\langle m|\rho) - \frac{i}{\hbar} \sum_k E(t) \cdot d_{km}\, tr(|n\rangle\langle k|\rho)$$

II.2. c) Ratengleichungen

Mehr-Niveausystem



Es findet sich eine Relaxation zum energetisch niedrigen 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.

$$\partial_t tr(|a\rangle\langle a|\rho) = -\underbrace{\Gamma^{a\to b}}_{\text{Relaxationsrate}}\, \underbrace{tr(|a\rangle\langle a|\rho)}_{\text{Besetzungsw.}} + \Gamma^{b\to a}\, tr(|b\rangle\langle b|\rho)$$

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

Die Raten Γ müssen berechnet werden (später)

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

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

Teilchenzahl muß erhalten werden.

$$\frac{\Gamma_{b\to a}}{\Gamma_{a\to b}} = \exp\left(-\frac{(\varepsilon_b-\varepsilon_a)}{k_B T}\right)$$

Detaillierte Balance

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

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

1) Mit $\frac{|\Gamma^{nn'}|}{|\Gamma^{n'n}|} = \exp\left(-\hbar(\varepsilon_n - \varepsilon_{n'})/k_B T\right)$

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

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

Was ist mit nicht diagonalen Anteil der Dichtematrix z. B. $tr(|n\rangle\langle m|\rho)$:

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

Dephasing

$$\Gamma_{nm,nm} = \frac{1}{2}\left(\Gamma_{nm} + \Gamma_{mn}\right) + \hat{\Gamma}_{nm}$$

Relaxationsprozesse.

Pure dephasing
Durch Umgebung Phase verloren.

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

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

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

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

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

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

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

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

Gemischter Zustand

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

Stärker Zerfall, Pure Dephasing ist Folge der Informationen über Umgebung fehlen.

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