2.5.3. Ableitung der Ratengleichungen

Ratengleichungen sind dynamische Gleichungen

für die Besetzungswahrscheinlichkeiten $\rho_{nn} \equiv \rho_n$.

die quantenmechanischen Übergangswahr-

scheinlichkeiten ρ_{mn} mit $m \neq n$ werden

dabei vernachlässigt, also auch

bestimmte Aspekte der Quantentheorie:

Stöße werden nicht zeitlich aufgelöst

Start: $$i\hbar \partial_t \rho_{nn} = \sum_m \left(V_{nm} \rho_{mn} - V_{mn} \rho_{nm} \right) \quad (\text{diagonal } \rho_{nn})$$

koppeln an Nichtdiagonalelemente:

$$i\hbar \partial_t \rho_{mn} = (\varepsilon_m - \varepsilon_n)\rho_{mn} + \sum_i \left(V_{mi} \rho_{in} - V_{in} \rho_{mi} \right)$$

müßten eigentlich selbstkonsistent gelöst werden.

kommt aus: $H = H_0 + V$

↗

Stöße oder
schwach zeitlich
abhängigen Feld

wie bekommt man Gleichungen für ρ_{nn} allein ?

__naiv__ : Nichtdiagonalelemente in $\dot\rho_{nn}$ weglassen, $(\rho_{mn} \to \delta_{mn}\rho_{nn})$

dann : rechte Seite $= 0$ $\to$ nicht zielführend

__besser__ : iteriere einmal die Gleichung f. ρ_{mn}'s,

um bessere Näherung zu kriegen

löse $\partial_t \rho_{mn} = -i(\omega_m - \omega_n)\rho_{mn} - iQ(t)$

$$\left(\frac{E}{\hbar} = \omega \; , \quad Q(t) = \sum_i \left(V_{mi}\rho_{in} - V_{in}\rho_{mi} \right) \right)$$

linear Dgl. 1. Ordng., inhomogene Lsg :

$$\rho_{mn}(t) = -i \int_{-\infty}^{t} dt' \, \frac{Q(t')}{\hbar} e^{-i(\omega_m - \omega_n)(t-t')} \qquad \hat{\text{ÜA}}$$

$$Q(t) \simeq \frac{1}{t_k}\left(V_{nn}\,\rho_{nn} - V_{mn}\,\rho_{nm}\right)$$

$\rho_{mn} = \delta_{mn}\,\rho_{nn}$: weggemittelt von Interferenzen,

Summe $-i$ geht über viele Phasen

$e^{i\Delta\omega_i t}$, also nur Diagonalelemente mitnehmen

einführen eine neue Koordinate

$\xi = t - t'$ ÜA

$$\dot{\rho}_{nn} = -i\int_0^\infty d\xi\, Q(t-\xi)\, e^{-i(\omega_m-\omega_n)\xi}$$

man sieht, um die Stoßprozesse nicht so genau zeitlich aufzulösen $Q(t-\xi) \approx Q(t)$,

dazu: Zeitraster Δt, auf dem kurze Prozesse wie ξ „durchrutschen".

auf der Zeitskala der Oszillation $e^{i\Delta\omega\xi}$ wird

$Q(t-\xi)$ als langsam betrachtet

$$\rho_{mn}(t) = -i\, Q(t) \underbrace{\int_0^\infty d\xi\, e^{-i(\omega_m-\omega_n)\xi}}_{\text{kann man ausrechnen}} \underbrace{e^{-\gamma\xi}}_{\substack{\text{phänomenologischer} \\ \text{Dämpfungsfaktor} \\ \text{(konvergenzerzeugend)}}}$$

γ – physikalisch:

- Wechselwirkung langsam einschalten
- berücksichtigt und korrigiert etwas die Fehler bisher

$$\rho_{mn}(t) = -i\, Q(t)\, \xi_\gamma(\omega_m-\omega_n)$$

$$\xi_\gamma = \frac{\gamma - i(\omega_m-\omega_n)}{(\omega_m-\omega_n)^2+\gamma^2} \quad \text{i.A.}$$

(Realteil : $\xi_{\gamma\to 0} = \pi\,\delta(\omega_m-\omega_n)$)

drückt E-Erhaltg. beim Stoß aus. (Diskussion später)

ρ_{mn} jetzt in die Gleichg. für $\rho_{nn} = \rho_n$ einsetzen ÜA

<u>Resultat sind die Ratengleichungen / Mastergleichungen</u>

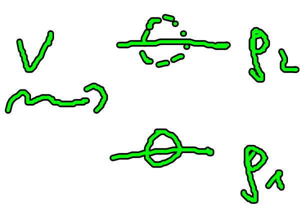
$$\partial_t \rho_n(t) = -\sum_m W_{n\to m}\,\rho_n(t) + \sum_m W_{m\to n}\,\rho_m(t)$$

mit den Raten:

$$W_{m \rightleftarrows n} = \frac{2\pi}{\hbar^2}\,|V_{nm}|^2\,\delta(\omega_n-\omega_m)$$

<u>Bemerkungen:</u>

- beschreibt die Dynamik von den Besetzungswahrscheinlichkeiten ρ_n als Fkt der Zeit unter Einfluss einer WW: V

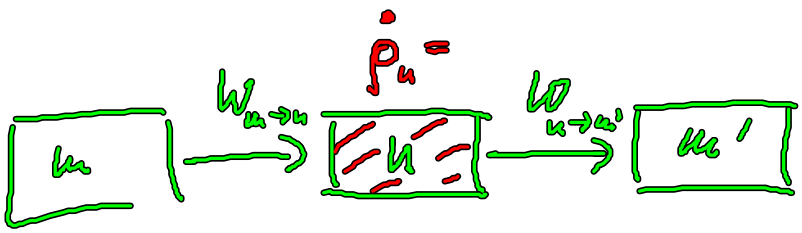


- rechts stehen W's, Einheit $\frac{1}{s}$, sind Raten mit denen die ρ_n sich verändern, kann mit Fermis-Goldenen Regel interpretiert werden

- die zwei Terme sind Konkurrenzprozesse:

„ $-$ ": Ausstreuterm, entleert ρ_n

„ $+$ ": Einstreuterm, füllt ρ_n



- wenn ein Nichtgleichgewichtszustand ($\dot{\rho}_n \neq 0$) vorliegt, so wird in allgemein das System sein Gleichgewichtszustand durch Stöße finden ($\dot{\rho}_n = 0$)

$$\rho_n(t) \xrightarrow[V]{} \rho_n^0$$

- <u>Zustandsdichte</u> einführen:

man möchte System beschreiben wo Energien dicht liegen

diskrete $\rightarrow$ kontinuierlicher Index

$\sum_n \qquad\qquad \int d\varepsilon$

$$M = \sum_{n=1}^{M} 1 = \sum_{\text{alle } \Delta\varepsilon_n} \Delta m(\varepsilon_n) = \sum_{\{\Delta\varepsilon_n\}} \frac{\Delta m(\varepsilon_n)}{\Delta\varepsilon_n}\,\Delta\varepsilon_n$$

Zahl aller Zustände

Δm ist Zahl der Zustände um ε_n im zugehörigen Intervall $\Delta\varepsilon_n$

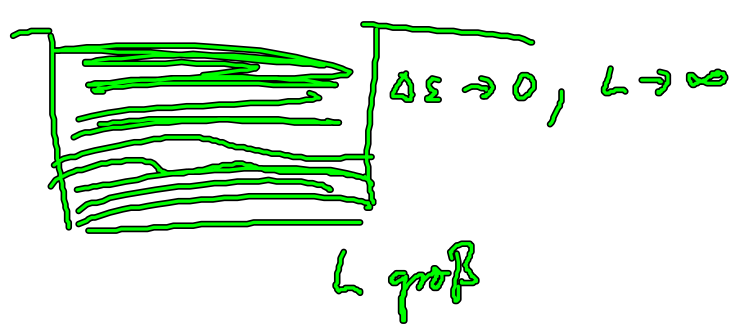
$\Delta\varepsilon_n \rightarrow 0$

$$M = \int d\varepsilon\, \underbrace{D(\varepsilon)}_{}$$

Zustandsdichte $D(\varepsilon)$

$\widehat{=}$ Anzahl der Zustände pro Energieintervall

wichtig: Kasten



Raten ansehen:

$$\sum_m w_{m\to n} = \sum_m \frac{2\pi}{\hbar^2} |V_{mn}|^2 \delta(\omega_m - \omega_n)$$

Ausbeuterate

$$= \sum_m \frac{2\pi}{\hbar} |V_{mn}|^2 \delta(\varepsilon_m - \varepsilon_n)$$

Idee

$$\left| \sum_m \to \int d\varepsilon\, D(\varepsilon) \right| = \int d\varepsilon_m\, D(\varepsilon_m)\, 2\pi \frac{|V(\varepsilon_n, \varepsilon_m)|^2}{\hbar} \delta(\varepsilon_n - \varepsilon_m)$$

$$= D(\varepsilon_n) \frac{2\pi}{\hbar} |V(\varepsilon_n, \varepsilon_n)|^2$$

Mastergleichg.

$$\dot{\rho}_\varepsilon \Big|_{\text{Ausbeu}} = -D(\varepsilon) \frac{2\pi}{\hbar} |V(\varepsilon, \varepsilon)|^2 \rho_\varepsilon$$

proportional zur Zustandsdichte

Was sind die Lösungen der Rategleichg. im Gleichgewicht?

2.6 Gleichgewicht

2.6.1. Was bedeutet Gleichgewicht?

Im Gleichgewicht gibt es keine Zeitabhängigkeit der mittelwerte der Observablen

$$\langle \dot{g}_\nu \rangle = 0,$$

z.B. Druck eines Gases, Lage und der Fülle des Behälters

$$\partial_t \langle g_\nu \rangle = \partial_t \, sp(\rho \, g_\nu) = 0$$

Zeitabhängigkeit

$\rightarrow \dot{\rho} = 0$, ρ ist im GG. zeitunabhängig

$$\rho_{nn} = \langle n | \rho | n \rangle \rightarrow \partial_t \rho_{nn} = 0 = \partial_t \rho_n$$

ρ_n ist im Gleichgewicht nicht mehr zeitabhängig

setze $\rho_n = \rho_n^0$ $\quad$ ($0 \,\hat{=}$ Gleichgewicht)

Ziel: wie findet man ρ_n^0 für das Gleichgewicht.

weitere Folgerung:

$$\partial_t \langle g_\nu \rangle = 0 = \frac{i}{\hbar} \langle [H, \rho] \, g_\nu \rangle$$

aus von Neumann-Gleichung

$\rightarrow$ im Gleichgewicht:

$[H,\rho] = 0 \;\longrightarrow\;$ H und ρ haben gemeinsame Eigenfunktionen

$$\rho = \sum_n \rho_n |n\rangle\langle n|, \quad \text{wenn} \quad H|n\rangle = E_n |n\rangle$$

$$\rho_n = \langle n|\rho|n\rangle$$

Kennen Sie schon ein Gleichgewichtsensemble?

$$R_{gk} = \frac{1}{Z_{gk}} e^{-\beta(H-\mu N)}$$ ist ein Gg. statist. Operator

$$[R_{gk}, H] = 0 \quad \text{weil} \quad \underbrace{[H,H]=0}_{\xi_1},\ \overbrace{[H,N]=0}^{\xi_2}$$

kein effektiver Teilchenerzeugungsprozess drin

$\rightarrow \dot{N} = 0 \mathrel{\hat{=}} [H,N]$