2. Zeitabhängige Störungen

Zwei Möglichkeiten f. Zeitabhängigkeit:

a) zeitunabhängige Störung $\underline{V}$ einschalten → Dynamik d. Observablen / Zustände

b) zeitabhängige Störung $\underline{V} = \underline{V}(t)$

Bsp f. a) : interne Wechselwirkung – Coulomb-WW

b) : externes optische Feld (explizit zeitabhängig)

2.1. Allgemeiner Zugang

$$|\psi(t)\rangle = \sum_m c_m(t)\,|m\rangle \;, \quad \text{gesucht sind Observablen über } c_m\text{'s}$$

$$i\hbar\,\dot{C}_m = \varepsilon_m c_m + \sum_k c_k V_{mk}(t) \;, \quad \hbar\Omega_{mk} = \langle m|V|k\rangle$$

Observablen-EW: $\langle\psi(t)|\ \underline{O}\ |\psi(t)\rangle$ zur Observable $\underline{O}$

Bsp. Dipoldichte $\underline{O} \equiv \underline{\vec{P}}$ in Optik

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

gesucht sind:

- Matrixelemente $\langle n|\underline{O}|m\rangle = O_{nm}$: Stärke der WW mit externem Feld
- $c_n^*(t)\, c_m(t) \equiv \rho_{nm}(t)$: zeitl. Dynamik der WW – " –

Interpretation:

— $|m\rangle$ $\qquad \rho_{mm}(t) = c_m^*(t)\, c_m(t)$

Wahrscheinlichkeit System in $|m\rangle$ zu finden

$\rho_{n\neq m}(t) = c_n^*(t)\, c_m(t)$

— $|n\rangle$ $\qquad$ Übergangswahrscheinlichkeitsamplitude

(Überlagerung zwischen $|n\rangle$, $|m\rangle$;

$\rho_{n\neq m} \neq 0$ „Quantenkohärenz")

Gleichung f. $\rho_{nm}(t)$?

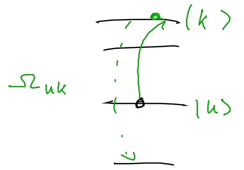
$$\dot{c}_n^* = i\omega_n c_n^* + i\sum_k c_k^* \Omega_{nk}^* \quad \Big|\cdot c_m \qquad (\rho_{nm}^* = \rho_{mn})$$

$$\dot{c}_m = -i\omega_m c_m - i\sum_k c_k \Omega_{mk} \quad \Big|\, c_n^* \cdot$$

Addition ?

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

geschlossenes System f. ρ_{nm} unter Störung $\Omega_{kn} = \dfrac{V_{kn}}{\hbar}$, $\quad \omega_n = \dfrac{\varepsilon_n}{\hbar}$



Bsp. Zweiniveausystem an ÜA

Grenzfälle:

a) Lösung in voller Schönheit: enthält wesentliche Quanteneffekte $\rho_{nm} \neq 0$ $(n\neq m)$

$\Delta E\, \Delta t \gtrsim \hbar$ (Energiesatz nur eingeschränkt gültig)

b) Lösung in reduzierter Schönheit

klassischer Grenzfall, Energieerhaltg. → „Pauli-Mastergleichungen"

2.2. Mastergleichungen f. ρ_{nm} mit $n = m$

Unter welchen Bedingungen sind Überlagerungen v. Zuständen nicht wichtig?

$(\rho_{n \neq m} \Rightarrow 0)$

$$\dot{\rho}_{ee} = i \sum_k \left(\rho_{ke} \Omega_{ke} - \rho_{ek} \Omega_{ek} \right) \xrightarrow{\rho_{ek} = \delta_{ek} \rho_{kk}} 0$$

Schlechte Näherung! denn ρ_{ee} würde sich nie ändern!

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

WW-Start bei $-\infty$

Lösung der inhomogenen Dgl.

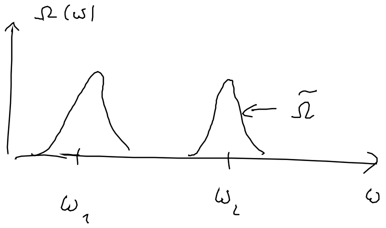
$s = t - t'$ als neue Variable

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

Gedächtnisintegral: Quantenkohärenz ist abhängig von allen vorhergehenden Zeiten s (t')

Welleninterferenz, statt Billardkugeln

Fourierzerlegg. f. die WW $\quad \Omega_{nk}(t) = \sum_j \tilde{\Omega}^1_{nk}(t)\, e^{-i\omega_j t}$



<u>Bsp.</u> optisches / magnetisches Feld

ebenso: $\rho_{nl}(t) = \tilde{\rho}_{nl}(t)\, e^{-i(\omega_n-\omega_l)t}$

$$\rho_{kl}(t) = i \sum_{j,n} \int_0^\infty ds\, e^{i(\omega_k-\omega_l)s} \Big(e^{i(\omega_n-\omega_l)(t-s)}\, \tilde{\rho}_{nl}(t-s)\, e^{-i\omega_j(t-s)}\, \tilde{\Omega}^1_{nk}(t-s)$$
$$- e^{i(\omega_k-\omega_n)(t-s)}\, \tilde{\rho}_{kn}(t-s)\, e^{-i\omega_j(t-s)}\, \tilde{\Omega}^1_{ln}(t-s) \Big)$$

<u>Näherungen:</u>

a) Quantenkohärenz geht $\to 0$, weil Summe über viele Phasen $e^{i\Delta\omega t}$ ...

Hoffnung: wegmitteln in makroskop. System

$\sum_n \tilde{\rho}_{nl} \to \sum_n \delta_{nl}\, \tilde{\rho}_{nl}$: klassische Wahrscheinlichkeiten $n=l$

b) Gedächtnis $\to 0$: $\tilde{\rho}_{nn}(t-s) \to \rho_{nn}(t) \quad s \to 0$

≙ langsame Dynamik, d.h. Rasterung Δs so daß Unschärfe nicht wichtig ist.

c) $\Rightarrow \int_0^\infty ds\, e^{i(\omega_k-\omega_l+\omega_j)s} = \pi\,\delta(\omega_j+\omega_k-\omega_l)$ + Hauptwerte, die wegfallen

$$= \pi \frac{1}{\hbar}\, \delta(\varepsilon_j+\varepsilon_k-\varepsilon_l)$$

$\hat{=}$ Energieerhaltung $\qquad \overset{\varepsilon_k}{|k\rangle} \longrightarrow \overset{\varepsilon_e}{|e\rangle}$

Absorption ε_j Quant aus Störung

$$\dot{\rho}_{ee} = -2\pi \sum_{k,j,i} \delta(\omega_j + \omega_k - \omega_e)\, e^{-i(\omega_j - \omega_i)t}\, \tilde{\Omega}^j_{ek}(t)\, \tilde{\Omega}^i_{ke}(t) \left(\rho_{ee}(t) - \rho_{kk}(t)\right)$$

$\sum_{ij} \underline{\delta_{ij}}$, weil $\tilde{\Omega}^j \tilde{\Omega}^i e^{-i(\omega_j - \omega_i)t}$:

schnelle Schwingg. mitteln sich weg.

$$\dot{\rho}_{ee} = -\sum_k \Gamma^{aus}_{e\to k}\, \rho_{ee}(t) + \sum_k \Gamma^{ein}_{k\to e}\, \rho_{kk}(t)$$

Änderung der Wahrscheinlichkeit System in $|e\rangle$ zu finden

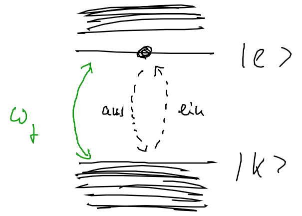
Aus- und Einstreuung der Wahrscheinlichkeit mit Rate $\Gamma^{aus}_{e\to k}$ und $\Gamma^{ein}_{k\to e}$

$$\Gamma^{aus}_{e\to k} = 2\pi \sum_j \delta(\omega_j + \omega_k - \omega_e)\, \tilde{\Omega}_{ek}(t) \equiv \Gamma^{ein}_{k\to e}$$

<u>Bemerkungen</u>:

a) Gleichungen heißen „Pauli-Mastergleichungen"

b) anschaulich:



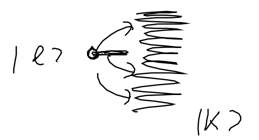
c) Störg.: entweder intern Feld / extern Feld

d) Übergänge sind energieerhaltend

e) Fermis golden Regel:

zu Beginn Dynamik alles $\rho_{ee} = 1$, $\rho_{kk} = 0$ $(k \neq e)$

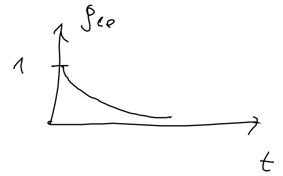
$\downarrow$ $\dot{\rho}_{ee} = -\Gamma_{aus}\, \rho_{ee}$ (wenn ρ_{kk} immer nahe Null bleibt)



f. 1. Störfrequenz $\omega_j = \omega$

$$\Gamma_{aus} = 2\pi \sum_k \delta(\omega + \omega_k - \omega_e)\, |\tilde{\Omega}_{ek}(t)|^2$$

$$\rho_{ee}(t) = \rho_{ee}(t_0)\, e^{-\Gamma_{aus} t}$$



Die Rate f. die Ausstrahlung in ein Kontinuum vieler Zustände ($|k\rangle$)

$$\Gamma_{aus} = \frac{2\pi}{\hbar} \sum_k \underbrace{\delta(\varepsilon + \varepsilon_k - \varepsilon_e)}_{\text{E-Erhaltung}}\, \underbrace{|\hbar \tilde{\Omega}_{ek}|^2}_{\text{Auswahlregel}}$$

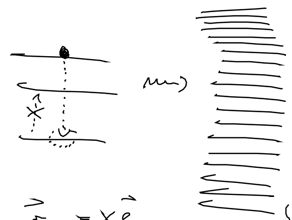
aus dem zu Beginn populierten Zustand $|e\rangle$

heißt Fermis goldene Regel.

$\hat{=}$ Einfachfall der Pauli Mastergleichungen

2.3. Nur der Grundzustand ist stabil

Kopplung eines Atoms an Umgebung: Modellierung d. Satz v. Oszillatoren



$\vec{r}_{el} = x\vec{e}_x$ $\qquad \{i\}$

Kontinuum v. Oszillatoren $\{q_i\}$ welche Energie aufnehmen kann.

$$\underline{V} = \sum_i \tilde{g}_i\, x \cdot q_i = \sum_i g_i\, x \cdot (a_i^+ + a_i)$$

viele Oszis mit Kopplung $\tilde{g}_i$

Kein zeitabh. Potential

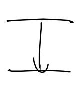
$$\Gamma^{abs} = \sum_k \Gamma^{abs}_{e \to k} = 2\pi \sum_j \delta(\cancel{\omega_j} + \omega_k - \omega_e)\, |\tilde{\Omega}_{ek}(t)|^2$$

$|k\rangle : \quad |n_1\rangle |n_2\rangle \cdots |\alpha\rangle$

$|e\rangle :$ Quantenvakuum d. Oszillatoren · $\underline{\text{angeregtes Elektron}}$ $= |n_1 = 0\rangle |n_2 = 0\rangle \cdots \underline{|2\rangle}$

$$\tilde{\Omega}_{ke} = \langle k | \sum_i g_i\, x (a_i^+ + a_i) | e\rangle = \langle k | \sum_i g_i\, x\, a_i^+ | e\rangle \quad , \quad a_i |n_i = 0\rangle = 0$$

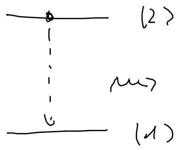
$$= \underbrace{\langle \alpha | x | 2\rangle}_{\substack{\text{Dipolmoment } d_{\alpha 2} \\ \text{f. Zweiniveausystem} \\ \text{muß } \alpha = 1 \text{ sein}}} \cdot \sum_i g_i \underbrace{\underbrace{\prod_k \langle n_k |\, a_i^+}\ \underbrace{\prod_l | n_l = 0\rangle}}_{\text{Produktansätze f. Oszillatoren} \ \to\ \delta_{n_k, n_i = 1}}$$



$$\Gamma^{2 \to 1}_{\{0\} \to \{1\}} = 2\pi\, \delta(\omega_2 - \omega_1 - \omega_k)\, |\langle 1 | x | 2\rangle|^2 \cdot |g_k|^2$$

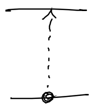
Oszillatoren mit Null / 1 Quant

ω_2: elektr. Energie oben; ω_1: elektr. unten; ω_k: k-ter Oszillator angeregt



$\rightsquigarrow \hbar\omega_k = \varepsilon_2 - \varepsilon_1$

Zustand 2 ist nicht stabil



verboten weil keine Energieerhaltg. mgl.

innerhalb Fermis goldener Regel ist der Grundzustand stabil.