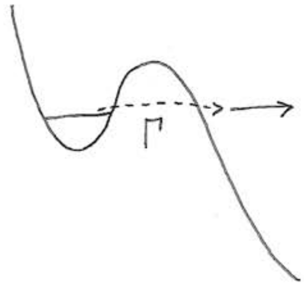
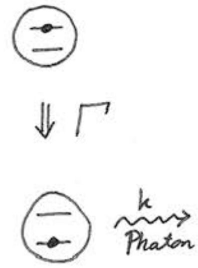
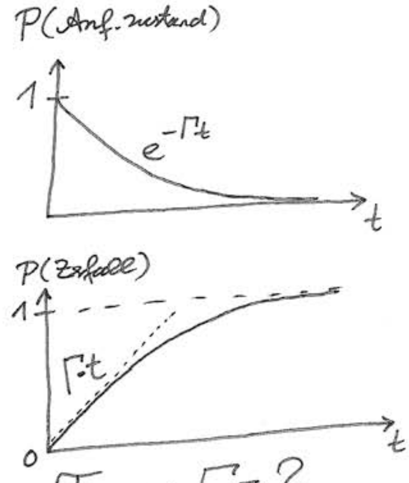
Zerfall: Fermis 'Goldene Regel'



Tunneln

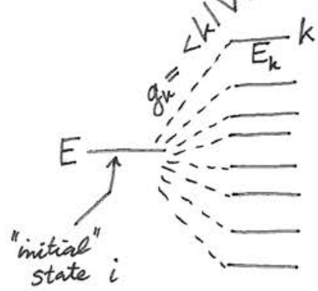


Spontane Emission eines Atoms



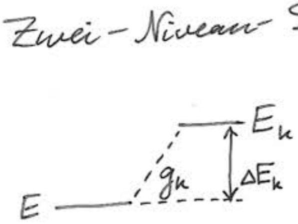
Frage: $\Gamma = ?$

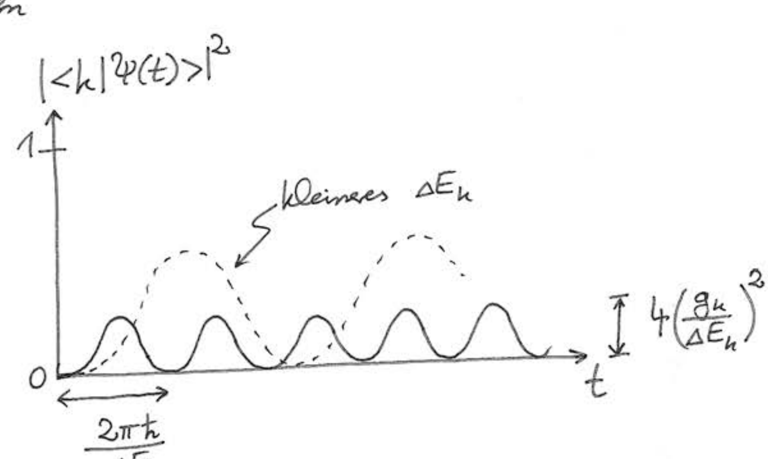
Allg. Situation:



g_k = Matrixelement

Erinnerung: Zwei-Niveau-System





Frage: Was ist

$$\sum_k |\langle k | \Psi(t) \rangle|^2 = 1 - |\langle i | \Psi(t) \rangle|^2$$

= W.keit, daß Zerfall stattgefunden hat.

$$\left(= \Gamma \cdot t \;\; ? \right)$$

Störungsrechnung:

$$|\psi(t)\rangle = c(t)\,|i\rangle + \sum_k c_k(t)\,|k\rangle$$

$\Rightarrow$ SGl:

$$i\hbar\,\dot{c}_k(t) = E_k c_k(t) + g_k c(t)$$

Näherung: $c(t) \approx 1 \cdot e^{-\frac{i}{\hbar}Et}$ (Zerfall noch nicht berücksichtigt)

falls $c_k(t=0)=0$

$\Rightarrow$

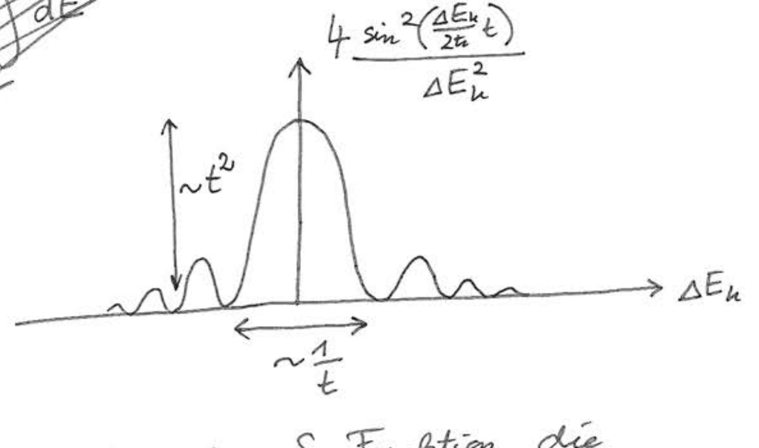
$$c_k(t) = \cancel{c_k(0)} + \frac{1}{i\hbar}g_k \underbrace{\int_0^t dt'\, e^{-\frac{i}{\hbar}E_k(t-t')}\, c(t')}_{\approx e^{-\frac{i}{\hbar}E_k t}\cdot \underbrace{\int_0^t dt'\, e^{\frac{i}{\hbar}(E_k-E)t'}}_{\frac{e^{\frac{i}{\hbar}\Delta E_k t}-1}{\frac{i}{\hbar}\Delta E_k}}}$$

$\Rightarrow$

$$|\langle k|\psi(t)\rangle|^2 = |c_k(t)|^2 = \left(\frac{g_k}{\Delta E_k}\right)^2 \cdot \underbrace{\left|e^{\frac{i}{\hbar}\Delta E_k t} - 1\right|^2}_{4\sin^2\left(\frac{\Delta E_k}{2\hbar}t\right)}$$

$\cancel{\sum_k |c_k(t)|^2 \approx \int dE'}$

~~Niveaus~~ dicht



$\Rightarrow$ Darstellung einer δ-Funktion, die Energieerhaltung ausdrückt!

$$\Delta E_k \overset{!}{\approx} 0 \;\Leftrightarrow\; E \approx E_k$$

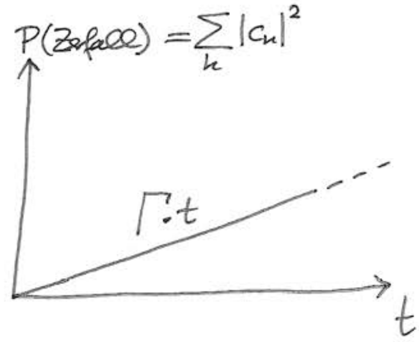
$$\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\sin^2\left(\frac{\Delta E}{2\hbar}t\right)}{\left(\frac{\Delta E}{2}\right)^2}\, d\Delta E \;=\; \frac{2t}{\hbar}\underbrace{\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\sin^2\left(\frac{\Delta E}{2\hbar}t\right)}{\left(\frac{\Delta E}{2\hbar}t\right)^2}\, d\Big(\overbrace{\frac{\Delta E}{2\hbar}t}^{x}\Big)}_{\pi}$$

Nun: Verwende <u>Zustandsdichte</u> $D(E) = \frac{\text{Niveaus}}{\text{En. intervall}} \Rightarrow \sum_k F(E_k) = \int dE'\, D(E')\, F(E')$

$$\Rightarrow \quad \sum_k |c_k(t)|^2 \underset{\substack{\uparrow \\ \text{falls Niveaus} \\ \text{dicht \&} \\ g_k \approx \text{const}}}{\approx} g_k^2 \int dE' \underbrace{D(E')}_{\substack{\text{Niveaus/} \\ \text{En. intervall} \\ = \text{Zust. dichte}}} \cdot \frac{\sin^2\left(\frac{\Delta E}{2\hbar}t\right)}{\left(\frac{\Delta E}{2}\right)^2}$$

hier: $\Delta E = E' - E$

$$= \underbrace{\frac{2\pi}{\hbar} g_k^2 \cdot D(E)}_{\substack{||| \\ \Gamma\,:\ \text{Zerfallsrate}}} \cdot t$$



Allgemeiner (falls $g_k \neq$ const):

$$\Gamma = \sum_k \Gamma_k$$

(Bem.: $D(E) \equiv \sum_k \delta(E - E_k)$)

mit $\Gamma_k = \frac{2\pi}{\hbar} g_k^2\, \delta(E - E_k)$

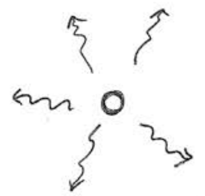
$$\text{also:} \quad \boxed{\Gamma_k = \frac{2\pi}{\hbar} |\langle k|\hat{V}|i\rangle|^2\, \delta(E - E_k)}$$

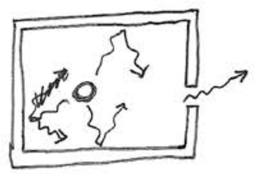
"energieerhaltende δ-Funktion"

<u>Fermis Goldene Regel</u>

(am Ende immer: $\sum_k \ldots = \int dE_k\, D(E_k) \ldots$)

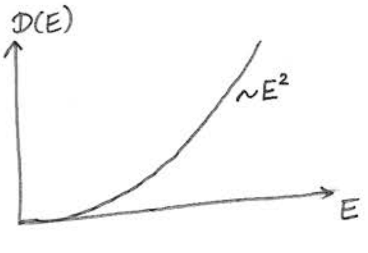
Bsp.: Spontane Emission — Purcell-Effekt

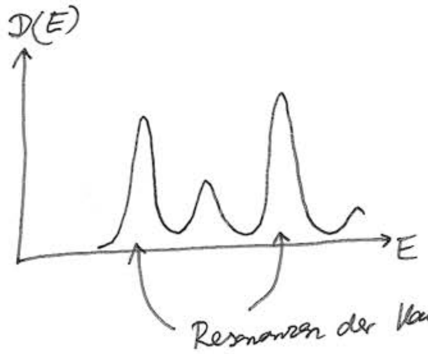




Emission im Kavität

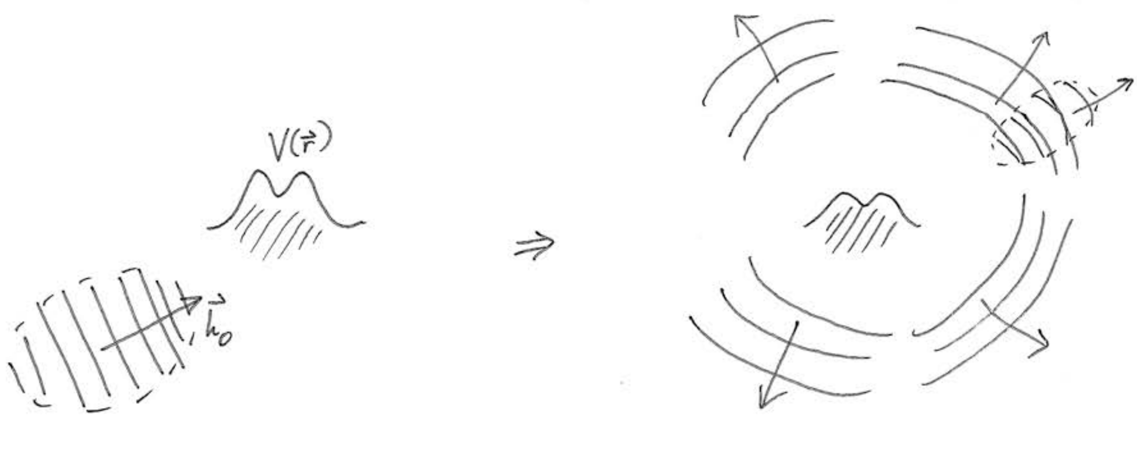
Emission ins Vakuum



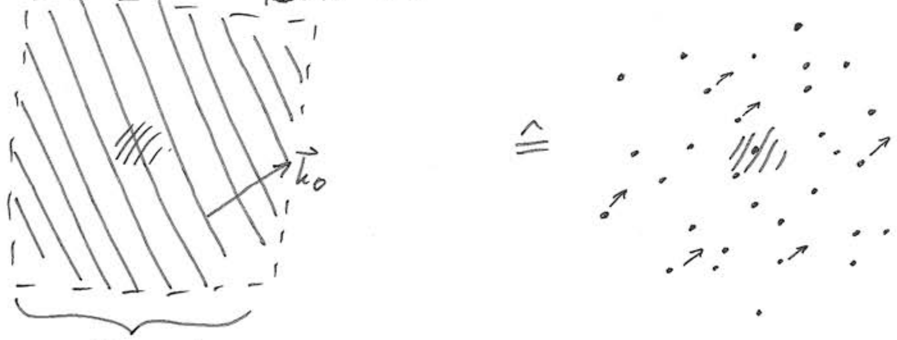


$\Gamma \sim D(E)$ <u>erhöht</u> an Resonanzen
<u>erniedrigt</u> sonst

Bsp.: Streuung am Potential



In der Rechnung: Ebene Welle über ganzen Raum verteilt



Vol (z.B.: periodische Randbed.)

$\Rightarrow$ Fermi:

$$\Gamma_{\vec{k}\leftarrow\vec{k}_0} = \frac{2\pi}{\hbar} \Big| \underbrace{\langle \vec{k} | \hat{V} | \vec{k}_0 \rangle}_{} \Big|^2 \, \delta(E_{\vec{k}} - E_{\vec{k}_0})$$

$$= \int \frac{d^3\vec{r}}{Vol} \, e^{-i[\vec{k}-\vec{k}_0]\vec{r}} \, V(\vec{r})$$

$\Rightarrow \Gamma_{\vec{k}\leftarrow\vec{k}_0} \sim \frac{1}{Vol^2} \longrightarrow$? Was bedeutet das? Macht das Sinn?

Ein Faktor $1/Vol$ kompensiert durch Zustandsdichte:

$$dN = D(E)\,dE = \frac{d}{dk}\left(\frac{\frac{4\pi}{3}k^3}{\left(\frac{2\pi}{L}\right)^3}\right)\frac{dk}{dE}\,dE \quad \sim Vol\, dE$$

$$\Rightarrow D(E) \sim Vol$$

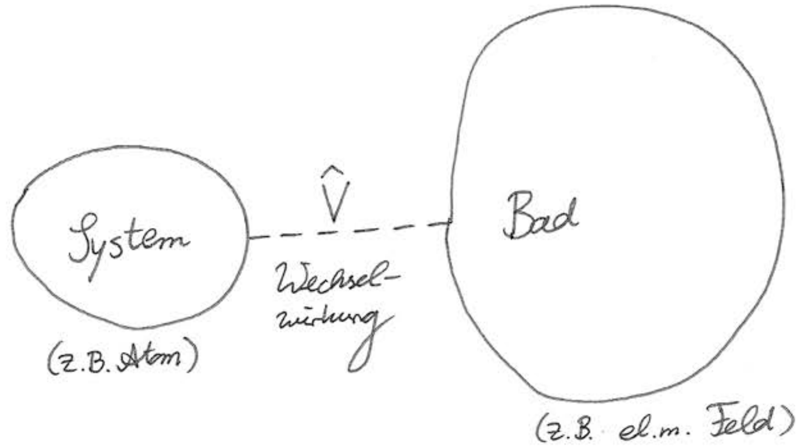
$$\Rightarrow \quad \Gamma = \sum_k \Gamma_{\vec{k}\leftarrow\vec{k}_0} \sim \frac{1}{Vol}$$

weil $|\Psi(\vec{r})|^2 \simeq \frac{1}{Vol}$

in $\Psi(\vec{r}) = \frac{e^{i\vec{k}\vec{r}}}{\sqrt{Vol}}$

$\Rightarrow$ Teilchen anfangs über Vol "verteilt"

$\Rightarrow$ geringe W.keit, das Hindernis zu treffen!



$$\hat{V} = -\hat{x}\cdot\hat{F}$$

$\hat{x}$: System-Operator

$\hat{F}$: Bad-Op. (fluktuierende Kraft, z.B. el. Feld am Atom)

$|i\rangle = |i_S, i_B\rangle$ "initial"

$|f\rangle = |f_S, f_B\rangle$ "final"

$$\Rightarrow \Gamma_{f\leftarrow i} = \frac{2\pi}{\hbar}\,|\langle f|\hat{V}|i\rangle|^2\,\delta(\underbrace{E_f}_{=E^{(B)}_{f_B}+E^{(B)}_{f_S}} - E_i)$$

$$= \frac{2\pi}{\hbar}\,|\langle f_S|\hat{x}|i_S\rangle|^2\cdot|\langle f_B|\hat{F}|i_B\rangle|^2\,\delta\big((E^{(B)}_{f_B}-E^{(B)}_{i_B})-(E^{(S)}_{i_S}-E^{(S)}_{f_S})\big)$$

falls f_B irrelevant:

$$\Gamma_{f_S\leftarrow i_S} = \sum_{f_B}\Gamma_{f_B,f_S\leftarrow i_B,i_S}$$

$$= \dots \left(\text{Trick mit } \int_{-\infty}^{+\infty} dt\, e^{i(\omega-\Delta E)t} = 2\pi\,\delta(\omega-\Delta E)\right)$$

(vgl. 2. Ordnung für $\delta E^{(2)}$)

$\Rightarrow$

$$\boxed{\Gamma_{f_s\leftarrow i_s} = \frac{1}{\hbar^2}\underbrace{|\langle f_s|\hat{x}|i_s\rangle|^2}_{\substack{\text{Übergangs-}\\ \text{matrixelement}^2\\ \text{des Systems}}}\cdot \underbrace{\langle\hat{F}\hat{F}\rangle_{\omega=(E^s_{i_s}-E^s_{f_s})/\hbar}}_{\substack{\text{Bad-Spektrum,}\\ \text{bei der Überg.-frequenz}}}}$$

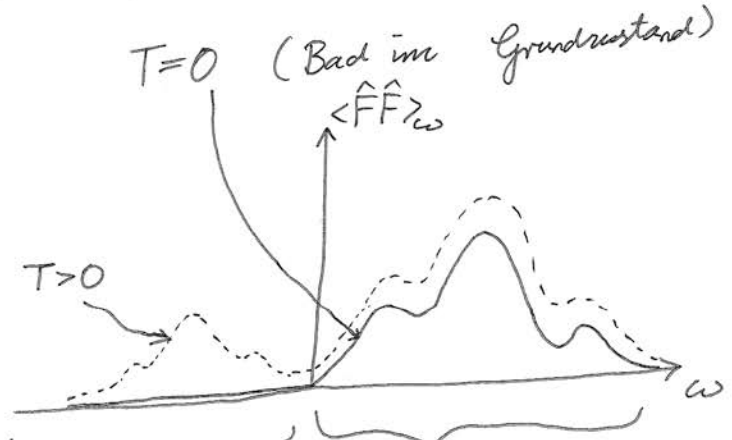
mit

$$S_{FF}(\omega)\equiv\langle\hat{F}\hat{F}\rangle_\omega \equiv \int_{-\infty}^{+\infty} dt\, e^{i\omega t}\langle i_B|\hat{F}(t)\hat{F}(0)|i_B\rangle$$

oder: therm. Mittelung

Zeitentwicklung mit $\hat{H}_{Bad}$ allein!

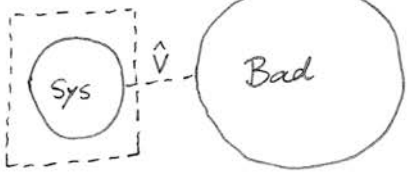
Typische Spektren:



$\omega<0$: Bad gibt Energie ab (nur bei T>0)

$\omega>0$: Bad nimmt Energie auf

7. Dichtematrix und lineare Antwort



$$|\psi\rangle = \sum_{j_S, j_B} \psi_{(j_S, j_B)} \underbrace{|j_S, j_B\rangle}_{\text{Produkt-Basis } |j_S\rangle_S \otimes |j_B\rangle_B} \qquad = \text{Zustand von Sys + Bad}$$

$\hat{A}$ wirke nur auf Sys.: $\hat{A}_{(S+B)} = \hat{A}_{(S)} \otimes \mathbb{1}_{(B)}$

$$\Rightarrow \langle \hat{A} \rangle = \langle \psi | \hat{A}_{(S+B)} | \psi \rangle = \ldots = \sum_{i,j,l_B} \underbrace{A_{ij}}_{\downarrow\ \text{Matrixelemente im Sys.}} \psi^*_{(i,l_B)} \psi_{(j,l_B)}$$

Definiere System-Dichtematrix: (um Bad zu "ignorieren")

$$\underset{(!)}{\rho^S_{ji}} \equiv \sum_{l_B} \psi^*_{(i,l_B)} \psi_{(j,l_B)}$$

$$\Rightarrow \langle \hat{A} \rangle = \sum_{i,j} A_{ij} \rho^S_{ji} \equiv \mathrm{tr}[\hat{A} \hat{\rho}^S]$$

Eigenschaften von $\hat{\rho} = \hat{\rho}^S$:

1. $\hat{\rho}^+ = \hat{\rho}$ (hermitesch)
2. $\hat{\rho}$ pos. definit: $\langle u | \hat{\rho} | u \rangle \geq 0 \ \forall |u\rangle$
3. $\mathrm{tr}\, \hat{\rho} = 1$

gelten auch, wenn

$$\rho^S_{ji} = \sum_{l_B} \overbrace{\rho^{S+B}_{(j,l_B)(i,l_B)}}^{\text{Sys+Bad Dichtematrix}}$$

"Bad aus-spuren"

Aus (1.)&(2.): $\hat{\varrho}$ hat Eigenwerte $\mathbb{R} \ni p_j \geq 0$
und ONB von Eigenvektoren $|\psi_j\rangle$

(3.) $\Rightarrow$ $\sum_j p_j = 1$

p_j = W.keit, $|\psi_j\rangle$ bei Messung (in ONB) zu finden

---

Frage: Zeitentwicklung?

Für <u>isoliertes</u> System (z.B. $\hat{\varrho} = \hat{\varrho}^{S+B}$):

$$i\hbar \frac{d}{dt}|\Psi\rangle = \hat{H}|\Psi\rangle$$

$\Rightarrow$ ... $\Rightarrow$

$$\boxed{i\hbar \frac{d}{dt}\hat{\varrho}(t) = [\hat{H}, \hat{\varrho}(t)]} \quad \Rightarrow \hat{\varrho}(t) = e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}\,\hat{\varrho}(0)\,e^{+\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}$$

(wenn $\hat{H}$ nicht zeitabhängig)

"von-Neumann-Gleichung"

Für <u>nicht isoliertes</u> System:
also: Wenn aber $\hat{\varrho} = \hat{\varrho}^S$ und $\hat{V} \neq 0$: i.a. kompliziert!

Dissipation!

Falls "$\hat{V}$ schwach" (z.B. $\Gamma \ll \frac{\Delta E^{sys}}{\hbar}$ und andere Bed.en)

<u>manchmal</u> möglich:

"<u>Lindblad-Master-Gleichung</u>"

(analog zu klass. Ratenglg. für W.keiten: $\dot{p}_j = -\Gamma p_j$ usw.)

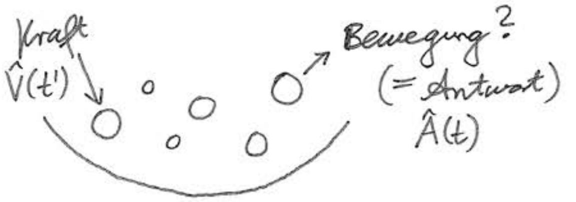
Bsp.: gedämpfter q.m. harmon. Osz.:

$$i\hbar \frac{d}{dt}\hat{\varrho}(t) = [\hat{H}, \hat{\varrho}(t)] + i\hbar\Gamma\left(\hat{a}\hat{\varrho}\hat{a}^+ - \frac{1}{2}\hat{a}^+\hat{a}\hat{\varrho} - \frac{1}{2}\hat{\varrho}\hat{a}^+\hat{a}\right)$$

"Relaxationsoperator" $\hat{a}$
beschreibt Dissipation

(Bem.: selbe Form mit $\hat{a} \mapsto \hat{a}^+$ für therm. Anregung
$\hat{a} \mapsto \hat{\sigma}^-$ für Zerfall im 2-Niv.-Sys. usw.)

Lineare Antwort



$$\hat H(t) = \hat H_0 + \underbrace{\hat V(t)}_{\text{"klein"}} \qquad \Rightarrow \hat\varrho(t) = \hat\varrho_0 + \underbrace{\delta\hat\varrho(t)}_{\text{"klein"}}$$

$$i\hbar \frac{d}{dt}\hat\varrho(t) = [\hat H(t), \hat\varrho(t)]$$

$\Rightarrow$ in 1. Ordnung ($\sim \hat V^1$, $\sim \delta\hat\varrho^1$; <u>kein</u> $\hat V \delta\hat\varrho$):

$$i\hbar \frac{d}{dt}\delta\hat\varrho(t) = [\hat H_0, \delta\hat\varrho(t)] + [\hat V(t), \hat\varrho_0]$$

$\Rightarrow$
$$\delta\hat\varrho(t) = \frac{1}{i\hbar}\int_{-\infty}^{t} dt' \; e^{-\frac{i}{\hbar}\hat H_0 (t-t')} [\hat V(t'), \hat\varrho_0] \, e^{+\frac{i}{\hbar}\hat H_0 (t-t')}$$

Sei $\quad e^{+\frac{i}{\hbar}\hat H_0 t'} \hat V(t') e^{-\frac{i}{\hbar}\hat H_0 t'} \equiv \hat V_I(t')$ $\hookrightarrow$ "WW-Bild"

~~$tr[\delta\hat\varrho(t)$~~

Antwort $\quad \delta\langle \hat A(t)\rangle = tr\{\delta\hat\varrho(t)\,\hat A\}$

$$= \frac{1}{i\hbar}\int_{-\infty}^{t} dt' \; tr\{[\hat V_I(t'), \hat\varrho_0]\, \hat A_I(t)\}$$

$$\underset{\text{Spur zyklisch}}{=} \frac{1}{i\hbar}\int_{-\infty}^{t} dt' \; tr\{\hat\varrho_0\, [\hat A_I(t), \hat V_I(t')]\}$$

$\Rightarrow$
$$\boxed{\delta\langle \hat A(t)\rangle = \frac{1}{i\hbar}\int_{-\infty}^{t} \langle [\hat A_I(t), \hat V_I(t')] \rangle \, dt'}$$

Spur bzgl. $\hat\varrho_0$

Kubo-Formel
für lineare Antwort

~~z.B.~~

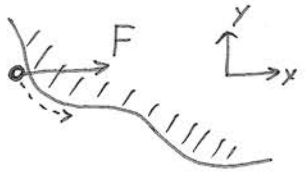
Bsp.: $\hat{V}(t) = -F(t)\,\hat{x}$

$\hat{A} = \hat{y}$

$$\Rightarrow \quad \delta\langle \hat{y}(t)\rangle = -\frac{1}{i\hbar}\int_{-\infty}^{t} \langle [\hat{y}_I(t), \hat{x}_I(t')]\rangle F(t')\,dt'$$

Suszeptibilität, in

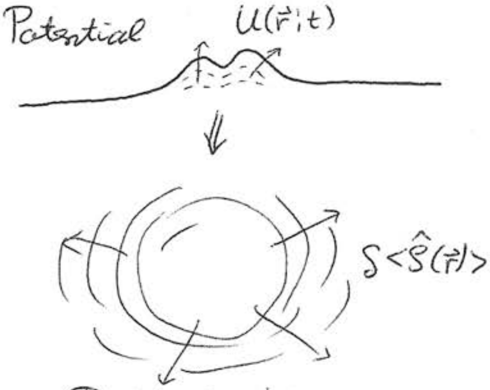
$$\delta\langle \hat{y}(t)\rangle \equiv \int_{-\infty}^{t} \chi_{yx}(t-t')F(t')\,dt'$$



~~Bsp.:~~

Bsp.: $\hat{V}(t) = \int d^3\vec{r}\,'\; U(\vec{r}\,',t)\,\hat{\rho}(\vec{r}\,')$

mit $\hat{\rho}(\vec{r}) = \hat{\Psi}^+(\vec{r})\hat{\Psi}(\vec{r})$



$\hat{A} = \hat{\rho}(\vec{r})$

$$\Rightarrow$$

$$\delta\langle\hat{\rho}(\vec{r})\rangle = +\frac{1}{i\hbar}\int_{-\infty}^{t}\int d^3\vec{r}\,'\;\langle[\hat{\rho}_I(\vec{r},t), \hat{\rho}_I(\vec{r}\,',t')]\rangle\, U(\vec{r}\,',t')\;dt'$$

$$= \int_{-\infty}^{t}\int \chi_{\rho\rho}(\vec{r},\vec{r}\,',t-t')\;U(\vec{r}\,',t')\;d^3\vec{r}\,'dt'$$

$\Rightarrow$ Ziel für beliebiges Quanten-Vielteilchensys.:
Berechne Dichte-Dichte-Korrelator!

(z.B. mit Satz von Wick
für nicht-wechselwirkende
Fermionen / Bosonen)