

IV11, Zeitliche Dynamik, Schrödinger-,  
Blochgleichungen, Dichtematrixtheorie

1. Beispiel (Wiederholung): Zeitabhängige SGL

$$i\hbar \partial_t |\psi\rangle = H |\psi\rangle$$

$$H = H_0 + H_{el-Licht}$$

Bewegungsgleichung:

$$i\hbar \partial_t \psi(\mathbf{r}, t) = \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V_{\text{ext}}(\mathbf{r}) \right) \psi(\mathbf{r}, t) + \delta(\mathbf{r}) d \cdot E(t)$$

2. Beispiel: Blochgleichungen (z.B. über Dichte-  
matrixtheorie)

$$H = H_0 + H_{el-L}$$

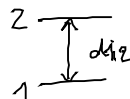
$$H_0 = \sum_n \epsilon_n |n\rangle \langle n|$$

$\uparrow$  Energie      Vieltteilchen-  
   Zustände

$$H_{el-L} = \sum_{nm} d_{nm} \cdot E(t) |n\rangle \langle m|$$

$\uparrow$  Dipolmoment

z.B. Zweiniveausystem



$$H_0 = \hbar \epsilon_1 |1\rangle \langle 1| + \hbar \epsilon_2 |2\rangle \langle 2|$$

$$H_{el-L} = \hbar d_{12} \cdot E(r, t) |1\rangle \langle 2| + \hbar d_{21} \cdot E(r, t) |2\rangle \langle 1|$$

Unter Verwendung der Liouville-von-Neumann-Gl:

$$\partial_t \rho = -\frac{i}{\hbar} [H, \rho]$$

$$P(t) = d_{12} \underbrace{\langle 1 | \rho | 2 \rangle}_{\rho_{12}} + c.c. \\ \rho_{nm} = \langle n | \rho | m \rangle$$

Blochgleichungen:

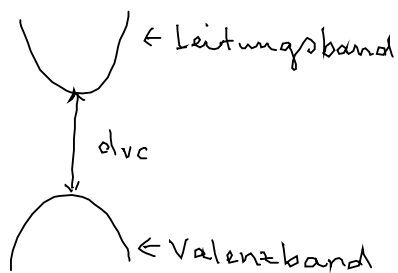
$$\partial_t \rho_{12} = -i(E_1 - E_2) \rho_{12} - i E \cdot d_{21} (\rho_{22} - \rho_{11})$$

$$\partial_t \rho_{11} = -i E \cdot d_{21} \rho_{21} + i E \cdot d_{12} \rho_{12} = 2 \operatorname{Im}(E \cdot d_{21} \rho_{21})$$

Beispiel für nicht lineare Gleichung in E.

3. Beispiel: Halbleiter Bloch-Gleichungen

2. Baudsystem



Freie Bewegung

$$H_0 = \sum_{\mathbf{k}} \epsilon_{v,\mathbf{k}} a_{v,\mathbf{k}}^\dagger a_{v,\mathbf{k}} + \sum_{\mathbf{k}} \epsilon_{c,\mathbf{k}} a_{c,\mathbf{k}}^\dagger a_{c,\mathbf{k}}$$

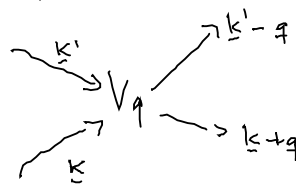
Elektron-Licht-WW

$$H_{e-l} = \hbar \sum_{\mathbf{k}} d_{vc} \cdot \mathbf{E} a_{v,\mathbf{k}}^\dagger a_{c,\mathbf{k}} + h.c. \quad i$$

Coulomb-WW

$$H_{\text{Coulomb}} = \sum_{\substack{\mathbf{k}, \mathbf{k}' \\ \mathbf{q} \neq 0 \\ \lambda, \lambda'}} V_{\mathbf{q}} a_{\lambda, \mathbf{k}+\mathbf{q}}^\dagger a_{\lambda', \mathbf{k}'-\mathbf{q}}^\dagger a_{\lambda', \mathbf{k}'} a_{\lambda, \mathbf{k}}$$

Enthält sowohl  
Intraband- wie  
Interbandanteile.



$$p_{\mathbf{k}} = \langle a_{c,\mathbf{k}}^\dagger a_{v,\mathbf{k}} \rangle$$

$$f_{\mathbf{k}}^e = \langle a_{c,\mathbf{k}}^\dagger a_{c,\mathbf{k}} \rangle$$

$$P(t) = \sum_{\mathbf{k}} p_{\mathbf{k}} d_{vc}$$

$$f_k^h = \langle a_{v,k}^\dagger a_{u,k} \rangle$$

Ergeben die Halbleiter-Blockgleichungen:

$$\begin{aligned} \partial_t p_k = & \frac{-i}{h} (\epsilon_{v,k} - \epsilon_{c,k} + i\gamma_0) p_k + \frac{i}{h} \left( \sum_{q \neq 0} V_q (f_{e,k+q} - f_{h,k+q}) \right) p_k \\ & + \frac{i}{h} \left( dvc \cdot E(t) + \sum_{q \neq 0} V_q p_{k+q} \right) (n_{c,k} - n_{v,k}) \end{aligned}$$

↖  
Nichtlinearität

$$\partial_t n_{eh} = 2 \operatorname{Im} \left( \left( dvc \cdot E(t) + \sum_{q \neq 0} V_q p_{k+q}^* \right) p_k \right)$$

Streuterme haben z.B. die Form  $n_1 n_2 (1-n_3)(1-n_4)$   
Pauli Blocking Term für Coulomb für Streuung  
von Zustand 1,2 und Zustand 3,4.

⇒ Nichtlinearität  
und Vektorisierung

⇒ Allgemeine Probleme  
klassifiziert.

### Vektorisierung und Klassifikation der Probleme

Zeitabhängige Probleme können für unsere Beispiele  
in Fälle klassifiziert werden (allgemein gibt es mehr)  
(eigentlich Spezialfall)

Lineare Probleme:

$$1) \quad \underline{\dot{u}} = \underline{A} \cdot \underline{u} \quad \left( \text{indem man } \underline{u} = \begin{pmatrix} v \\ f \end{pmatrix} \text{ setzt, können} \right.$$

Matrix      Vektor

auch Probleme der Form  $\underline{\dot{x}} = \underline{B} \cdot \underline{v} + f$  behandelt werden)

2) mit zeitabhängigen Matrix  $\underline{A}(t)$ :

$$\underline{\dot{u}} = \underline{A}(t) \cdot \underline{u} \quad \text{dabei kann es effizient sein im Fall}$$

z.B. Beispiel 1

$$\underline{A}(t) = \underline{A}_{\text{const}} + E(t) \underline{A}_{\text{dyn}}$$

zu setzen.

3)  $\dot{\underline{u}} = \underline{g}(\underline{u}, t)$  Allgemeine Form für Runge-Kutta, deutlich schwieriger in vektorisierte Fassung zu bringen.

Jetzt schauen wir uns die Probleme an und wie wir diese umsetzen können:

1. Beispiel: zeitabhängige Schrödinger Gleichung

$$i \hbar \partial_t \psi(\underline{r}, t) = \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_{\underline{r}} + V_{\text{coul}}(\underline{r}) \right) \psi(\underline{r}, t) + \delta(\underline{r}) \alpha \cdot \underline{E}(t)$$

Wir diskretisieren  $\psi(\underline{r}, t)$  z.B. auf Gitter  $\rightarrow \underline{\psi}$

$$\left( -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_{\underline{r}} + V_{\text{coul}}(\underline{r}) \right) \rightarrow \underline{A} = \text{const}$$

$$\underline{u} = \begin{pmatrix} \psi \\ \eta \end{pmatrix}$$

$$\delta(\underline{r}) \alpha \cdot \underline{E}(t) \rightarrow \underline{d} \cdot \underline{E}(t)$$

↓ konstanter Vektor

$$\partial_t \underline{u} = \begin{pmatrix} \underline{A} \text{ const} & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \cdot \underline{u} + \underline{E}(t) \begin{pmatrix} \underline{A} \text{ dyn} & 0 \\ 0 & \underline{d} \end{pmatrix} \cdot \underline{u}$$

diskretisiert und

$\Rightarrow$  Fall 2. bzw. Fall 1 sobald  $\underline{E}(t) = 0$

2. Beispiel: Blochgleichungen

$$\partial_t \underline{p}_{12} = -i (\epsilon_1 - \epsilon_2) \underline{p}_{12} - i E \cdot \underline{d}_{21} (\underline{p}_{22} - \underline{p}_{11})$$

$$\partial_t \rho_{11} / \rho_{22} = -1/2 \text{Im} (E d_{21} \rho_{21})$$

$$\underline{v} = (\rho_{12}, \rho_{21}, \rho_{11}, \rho_{22}) \quad (\text{Complex conjugierte Größen sind nicht so leicht zu vektorisieren } \rho_{12} = \rho_{21}^*)$$

$$\partial_t \underline{v} = \begin{pmatrix} -i(\epsilon_1 - \epsilon_2) & 0 & -iE d_{21} & iE d_{21} \\ 0 & +i(\epsilon_2 - \epsilon_1) & iE d_{21} & -iE d_{21} \\ -E d_{21} & E d_{21} & 0 & 0 \\ E d_{21} & -E d_{21} & 0 & 0 \end{pmatrix} \underline{v} \Rightarrow \partial_t \underline{v} = E(t) \underline{A} \cdot \underline{v}$$

$\Rightarrow$  wieder Fall 2)

Achtung hier gibt es ein Problem  $\epsilon_2 - \epsilon_1 \gg E \cdot d$ , daher wird der Zeitsolver sehr kleine Schritte benötigen um die Oszillation aufzulösen!

$$\text{Trick: } \underline{v} \rightarrow \tilde{\underline{v}} = (\tilde{\rho}_{12} e^{i\omega_e t}, \tilde{\rho}_{12} e^{-i\omega_e t}, \rho_{11}, \rho_{22})$$

$\downarrow$   
Lasersfrequenz

Mit  $\tilde{\rho}_{12} = \rho_{12} e^{i\omega_e t}$ , Rotating Frame

$$\Rightarrow \partial_t \tilde{\rho}_{12} = -i(\Delta) \tilde{\rho}_{12} - iE d_{21} (\rho_{22} - \rho_{11})$$

$$\text{mit } \Delta = (\epsilon_1 - \epsilon_2) + \omega_e$$

Ändert die vektorielle Form des Problems allerdings nicht.