## IV 11. Zeitliche Dynamik, Schrödinger-, Blochgleichungen, Dichtematrixtheorie

1 Beispiel (Wiederholung): Zeitabhängige SGL

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

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

Bewegungsgleichung:

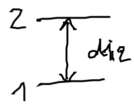
$$i\hbar \partial_t \Psi(r,t) = \left(-\frac{\hbar}{2m}\Delta_r + V_{coul}(r)\right)\Psi(r,t) + \delta(r)\, d\cdot E(t)$$

2. Beispiel: Blochgleichungen (z.B über Dichtematrixtheorie)

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

$$H_0 = \sum_n \underset{\uparrow\ \text{Energie}}{\varepsilon_n} \underbrace{|n\rangle\langle n|}_{\text{Vielteilchenzustände}} \qquad H_{el-L} = \sum_{nm} \underset{\uparrow\ \text{Dipolmoment}}{d_{nm}} \cdot E(t)|n\rangle\langle m|$$

z.B. Zweiniveausystem




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

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

Unter Verwendung der Liouville-van-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:

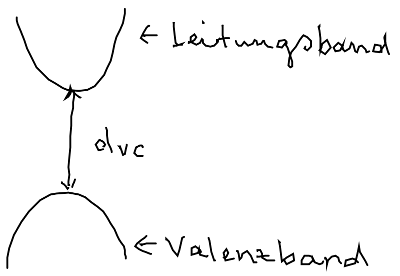
$$\partial_t \rho_{12} = -i(\varepsilon_1 - \varepsilon_2)\rho_{12} - i E \cdot d_{21} (\rho_{22} - \rho_{11})$$

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

Beispiel für nichtlineare Gleichung in E.

3. Beispiel: Halbleiter Bloch-Gleichungen

2. Bandsystem




Freie Bewegung

$$H_0 = \sum_k \varepsilon_{v,k} a^+_{v,k} a_{v,k} + \sum_k \varepsilon_{c,k} a^+_{c,k} a_{c,k}$$

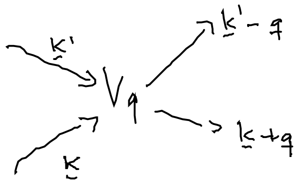
Elektron-Licht-WW

$$H_{e-L} = \hbar \sum_k d_{vc} \cdot E \, a^+_{v,k} a_{c,k} + h.a. \quad i$$

Coulomb-WW

$$H_{Coulomb} = \sum_{\substack{k,k' \\ q \neq 0 \\ \lambda \lambda'}} V_q \, a^+_{\lambda,k+q} a^+_{\lambda',k'-q} a_{\lambda' k'} a_{\lambda k}$$

Enthält sowohl Intraband- wie Interbandanteile.




$$p_k = \langle a^+_{c,k} a_{v,k} \rangle$$

$$f^e_k = \langle a^+_{c,k} a_{c,k} \rangle$$

$$P(t) = \sum_k p_k d^{cv}_k$$

$f^h_k = \langle a^+_{v,k} a_{v,k} \rangle$

Ergeben die Halbleiter-Blochgleichungen:

$$\partial_t p_k = \frac{-i}{\hbar} (\varepsilon_{v,k} - \varepsilon_{c,k} + i\gamma_0) p_k + \frac{i}{\hbar} \Big( \sum_{q \neq 0} V(q) \big( f_{e,k+q} - f_{h,k+q} \big) \Big) p_k$$
$$+ \frac{i}{\hbar} \Big( d_{vc} \cdot E(t) + \sum_{q \neq 0} V_q\, p_{k+q} \Big) (n_{c,k} - n_{v,k})$$

Nichtlinearität

$$\partial_t n_{e,h} = 2\, \mathrm{Im} \Big( \big( d_{vc} \cdot E(t) + \sum_{q \neq 0} V_q\, p^*_{k+q} \big) p_k \Big)$$

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.

$\Rightarrow$ Nichtlinearität und Vektorisierung $\Rightarrow$ 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) $\dot{\underline{u}} = \underline{\underline{A}} \cdot \underline{u}$ ($\underline{\underline{A}}$: Matrix, $\underline{u}$: Vektor)

(indem man $\underline{u} = \begin{pmatrix} \underline{v} \\ f \end{pmatrix}$ setzt, können auch Probleme der Form $\dot{\underline{v}} = \underline{\underline{B}} \cdot \underline{v} + f$ behandelt werden)

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

$\dot{\underline{u}} = \underline{\underline{A}}(t) \cdot \underline{u}$ dabei kann es effizient sein im Fall z.B. Beispiel 1

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

zu setzen.

3) $\dot{\underline{u}} = g(\underline{u}, t)$ 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

$$i \hbar \partial_t \psi(r,t) = \left(-\frac{\hbar}{2m} \Delta_r + V_{coul}(r)\right) \psi(r,t) + \delta(r)\, d \cdot E(t)$$

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

$\left(-\frac{\hbar}{2m} \Delta_r + V_{coul}(r)\right) \rightarrow \underline{\underline{A}}_{const}$

$\underline{u} = \begin{pmatrix} \underline{\psi} \\ 1 \end{pmatrix}$

konstanter Vektor

$\delta(r)\, d \cdot E(t)$

$\underline{d} \cdot E(t)$

diskretisierend

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

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

2. Beispiel: Blochgleichungen

$$\partial_t \rho_{12} = -i(\varepsilon_1 - \varepsilon_2)\rho_{12} - iE \cdot d_{21}(\rho_{22} - \rho_{11})$$

$$\partial_t \rho_{11}/\rho_{22} = -/+ 2\,\mathrm{Im}\,(E\, d_{21}\, \rho_{21})$$

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

$$\partial_t \underline{v} = \begin{pmatrix} -i(\varepsilon_1-\varepsilon_2) & 0 & -iE\,d_{21} & iE\,d_{21} \\ 0 & +i(\varepsilon_2-\varepsilon_1) & iE\,d_{21} & -iE\,d_{21} \\ -E\,d_{21} & E\cdot d_{12} & 0 & 0 \\ E\,d_{21} & -E\,d_{12} & 0 & 0 \end{pmatrix} \underline{v}$$

$$\Rightarrow \partial_t \underline{v} = E(t)\, \underline{\underline{A}} \cdot \underline{v}$$

$\Rightarrow$ wieder Fall 2)

Achtung hier gibt es ein Problem $\varepsilon_2 - \varepsilon_1 \gg E \cdot d$, daher wird der Zeitsolver sehr kleine Schritte benötigen um die Oszillation aufzulösen!

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

$\omega_e$: Laserfrequenz

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

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

mit $\Delta = (\varepsilon_1 - \varepsilon_2) + \omega_e$

Ändert die vektorielle Form des Problems allerdings nicht.