

3. Beispiel: Halbleiter-Blockgleichung

Bewegsgl. $\underline{v} = (p_{1k}, p_{1k}^x, f_{c1k}, f_{vk})$

$$\partial_t p_{1k} = -\frac{i}{\hbar} \underbrace{(\epsilon_{v,1k} - \epsilon_{c1k+1})}_{\text{lineare Term}} p_{1k} + \frac{i}{\hbar} \left(\sum_{q \neq 0} V(q) (f_{c,1k+q} - f_{v,1k+q}) \right) p_{1k}$$

Beachte dass
Term ist Fakt 3
genauer $\mathcal{G}(\underline{v}, t)$
Per Hand programm.

Produkt aus
zwei Größen
aus \underline{v} nicht als
 $\underline{A} \cdot \underline{v}$ darstellbar!
würde Tensor erforderlich

z. B.

$$\sum_{q \neq 0} V(q) (f_{c,1k+q} - f_{v,1k+q})$$

Faltung berechnen

Schwierig bei Parallelisierung, nicht alle f_{i+q} sind
auf dem richtigen Prozessor \Rightarrow kompliziert

Nächster Schritt: Algorithmus finden die 3 Fata.

- 1) $\underline{u} = \underline{A} \cdot \underline{u}$
- 2) $\underline{u} = \underline{A}(t) \cdot \underline{u}$
- 3) $\underline{u} = \mathcal{G}(\underline{u}, t)$

Lösungs-Verfahren

Es gibt viele Verfahren zu lösen, hier diskutieren wir
die beliebteste Familie der Runge-Kutta Algorithmen

(Achtung: Hier allgemein nicht spezielle 4. Ordnung
RK, der synonym als RK bezeichnet wird)

Allgemein sind unser Problem:

$$\dot{\underline{u}} = \mathcal{G}(\underline{u}, t)$$

Wir diskretisieren die Zeit:

$$a = t_0 < t_1 < \dots < t_n = b$$

$u(t_0)$ ist gegeben!

Gesucht sind jetzt Runge-Kutta Formeln der Form:
mit $u(t_n) = u_n$

$$u_{n+1} = u_n + h \sum_{i=1}^s b_i k_i \quad \leftarrow \quad k_1 = f(t_n, u_n) \quad i=1$$

\uparrow Schrittweite $h = t_{n+1} - t_n$
 $k_2 = f(t_n + c_1 h, u_n + h \sum_{j=1}^s a_{1j} k_j)$
 $\uparrow \uparrow$ Formel für $i=2, \dots, s$

Abschätzung des Fehlers:

$$u(t_n + h) - u_{n+1} = \sum_{i=1}^{\infty} h^i \sum_{j=1}^s \alpha_j^{(i)} \beta_j^{(i)}$$

Taylor-Entwickl.
für glatte Fkt

Koeffizienten, die hängen von a_{ij} und b_j ab.
Summe von gewissen partiellen Ableitungen

Das Schema verwendet die
Ableitung an verschiedenen Punkten
für die weitere Approximation!

Die Ordnung kann jetzt abgeschätzt werden über die Koeffizienten

sind alle $\alpha_j^{(i)} = 0$ für $i \leq h$, dann ist es ein
Schema n -Ordnung.

Zur Definition des Verfahrens müssen

c_i, b_i und a_{ij} gesetzt werden.

Für jede Ordnung gibt es verschiedene Koeffizienten kombinate,
die andere Vor- und Nachteile bzgl. Anzahl an Rechenschritten,
Stabilität, Schrittweite etc. haben.

Beispiel: Bogacki-Shampine (Appl. Math. Letters 2(4),
321 - 325 (1988))

$$\begin{array}{c|ccc}
 c_1 & 0 & & \\
 c_2 & \frac{1}{2} & & \\
 c_3 & \frac{3}{4} & & \\
 \hline
 & 1 & \frac{2}{3} & \frac{1}{3} & \frac{4}{9} \\
 & & b_1 & \dots & b_3
 \end{array}
 \quad \begin{array}{l}
 a_{21} \\
 a_{31} = a_{21} \\
 a_{32} \\
 \hline
 \end{array}$$

Für ein Verfahren 3. Ordnung.

Verfahren 3. Ordnung haben ein lokales Fehler von h^3

aufsummiert ist es h^4 . (1. Ordnung Verfahren mit h , sehr viel schneller benötigt höhere Diskretisierung)

Verfahren von Bogacki-Shampine

Es reduziert auf Verfahren 2. Ordnung!

$$\begin{array}{c|ccc} \frac{7}{24} & \frac{1}{4} & \frac{1}{3} & \frac{1}{8} \\ \hline \end{array}$$

Das erlaubt, die Fehler abzusätzen (skalieren anders) und Schrittweite h bei Rechnen anzupassen!

(embeddende Runge-Kutta):

Der Fehler ist dann

$$e_{n+1} = e_{n+1}^{(method1)} - e_{n+1}^{(method2)} = h \sum_{i=1}^5 (b_i^{(method1)} - b_i^{(method2)}) / c_i$$

Der Fehler muss dann innerhalb festgesetzter Toleranz sein. Falls nicht wird die Schrittweite vermindert.

Beispiel

$$\begin{array}{c|c} \text{Euler} & \\ \hline 0 & 0 \\ \hline 1 & 1 \end{array}$$

Original Runge-Kutta

$$\begin{array}{c|cccc} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & 0 & 0 & 0 \\ \frac{1}{2} & 0 & \frac{1}{2} & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ \hline \frac{1}{6} & \frac{1}{3} & \frac{1}{3} & \frac{1}{6} & \end{array}$$

Heun Method

$$\begin{array}{c|cc} 0 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 0 \\ \hline & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \end{array}$$

Embedded Method

$$\begin{array}{c|cc} 0 & & \\ 1 & 1 & \\ \hline & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ & 1 & 0 \end{array}$$

Heun und Euler

Fehlberg $Rk(1(2))$

$$\begin{array}{c|cc} 0 & & \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & \frac{255}{256} \\ 1 & \frac{1}{256} & \frac{255}{256} \\ \hline & \frac{1}{256} & \frac{255}{256} & 0 \\ & \frac{1}{512} & \frac{255}{256} & \frac{1}{512} \end{array}$$

IV.12 Korrelationsentwicklung

Im letzten Abschnitt gab es die Heisenberg-Bildgleichung:

$$i\hbar \dot{O}_H = [O_H, H_0] + \sum_k \sum_{\nu, \mu} \epsilon_{\nu, \mu} a_{\nu k}^\dagger a_{\mu k} + \sum_k \sum_{\nu, \mu} \epsilon_{\nu, \mu} a_{\nu k}^\dagger a_{\mu k} \quad (\text{Bandstruktur})$$

Elektron-Licht
w.w.: $H_{eL} = \sum_k \underline{d}_{jk} \cdot \underline{E} a_{\nu k}^\dagger a_{\mu k} + h.c.$

Coulomb: $H_{Coulomb} = \sum_{\mu, \nu, \lambda} V_{\mu\nu\lambda} a_{\mu, \nu}^\dagger a_{\lambda, \mu}^\dagger a_{\lambda, \nu} a_{\mu, \lambda}$

Selbstenergie der Heisenberg-Bildgleichung: (z.B. für $p_k = \langle a_{\nu k}^\dagger a_{\mu k} \rangle$
analog für $t_k = \langle a_{\nu k}^\dagger a_{\mu k} \rangle$)

1. Heisenberg-Bewegungsgleichung $\frac{d}{dt} A = \frac{i}{\hbar} [H, A] + \dot{A}$

$$\begin{aligned} \dot{\langle a_{\nu k}^\dagger a_{\mu l} \rangle} &= i(\epsilon_{\nu k} - \epsilon_{\mu l}) \langle a_{\nu k}^\dagger a_{\mu l} \rangle \\ &+ \underline{d}_{jk} \cdot \underline{E} \langle a_{\nu k}^\dagger a_{\mu l} \rangle - \underline{d}_{\mu l} \cdot \underline{E} \langle a_{\nu k}^\dagger a_{\mu l} \rangle \\ &+ 2 \sum_{\vec{k}, \vec{q}} V_{\vec{q}} \langle a_{\nu k}^\dagger a_{\mu, k+q}^\dagger a_{\lambda, k-q} a_{\lambda, k} a_{\mu l} \rangle \\ &- 2 \sum_{\vec{k}, \vec{q}} V_{\vec{q}} \langle a_{\nu k}^\dagger a_{\lambda, k-q}^\dagger a_{\lambda, k} a_{\mu, k+q} a_{\mu l} \rangle \end{aligned}$$

Das sind als strikte Gleichung für Operatoren, aber Erwartungswert $\langle \dots \rangle = \langle \dots \rangle$

Wir sehen, dass $\langle a_{\nu k}^\dagger a_{\mu l} \rangle$ an $\langle a_{\nu k}^\dagger a_{\mu l} \rangle$ koppelt.

Dies ist das Hierarchie-Problem der Vielteilchenphysik.

Wichtiges $\langle a_{\nu k}^\dagger a_{\mu l} \rangle$ durch Coulomb koppelt an

$$\langle a_{\nu k}^\dagger a_{\mu l}^\dagger a_{\lambda, k+q} a_{\lambda, k} \rangle, \langle a_{\nu k}^\dagger a_{\mu l}^\dagger a_{\lambda, k+q} a_{\lambda, k} a_{\mu, k+q} \rangle \rightarrow \langle a_{\nu k}^\dagger a_{\mu l}^\dagger a_{\lambda, k+q} a_{\lambda, k} a_{\mu, k+q} a_{\mu, k} \rangle$$

- $\langle a^+ a \rangle \hat{=} \text{Einteilchenkorrelation}$
- $\langle a^+ a a \rangle \hat{=} \text{Zweiteilchenkorrelation}$
- $\langle a^+ a a a \rangle \hat{=} \text{Dritteilchenkorrelation}$

Idee die Entwicklung zu schlüsseln ist die Mehrteilchen in niedrigeren Teilchenkorrelation zu entwickeln z.B.

Annahme $g = \frac{-\sum_{ij} b_{ij} a_i^+ a_j}{Z}$ bedeutet g wird nur in Einteilchenkorrelation beschrieben.

führt zur Heisenberg-Fock-Faktorisierung

$$\langle a_1^+ a_2^+ a_3^+ a_4 \rangle = \langle a_1^+ a_4 \rangle \langle a_2^+ a_3 \rangle - \langle a_1^+ a_3 \rangle \langle a_2^+ a_4 \rangle + \delta \langle a_1^+ a_2^+ a_3 a_4 \rangle$$

Fehler der Entwicklung oder korrelierter Anteil!

Im allg. den Bewegungsgl. für $\langle a_1^+ a_2 \rangle$

und $\delta \langle a_1^+ a_2^+ a_3 a_4 \rangle$ aufstellen.

Verteil dieser Aufteilung, der korrelierte Anteil ist i.a. klar als der unkorrelierte Anteil, da nur die Abweichung vom korrekten Verhalten.

Diese Abweichung sind im allg. klar, daher nimmt man Ergebnis mit $\delta \langle \dots \rangle$ als mit $\langle a_1^+ a_2^+ a_3 a_4 \rangle$.

Verallgemeinerung: $\langle a_1^+ a_2^+ a_3^+ a_4 a_5 a_6 \rangle = \pm \langle a^+ a \rangle \langle a^+ a \rangle \langle a^+ a \rangle \dots$ (Einteilchenanteile)

reine Mehrteilchenanteil $\pm \langle a^+ a \rangle \delta \langle a^+ a^+ a a \rangle$

$\pm \delta \langle a^+ a^+ a a \rangle \langle a^+ a \rangle$

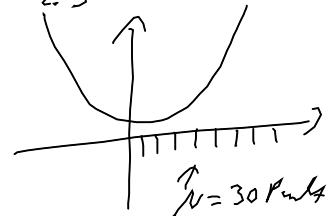
Strategien für die Numerik (Vektoring) $\pm \delta \langle a_1^+ a_2^+ a_3^+ a_4 a_5 a_6 \rangle$

Betrachte $\langle a^+ k_1 a k_2 \rangle$: λ bestimmt die Anzahl der Böden 2×2

k_1 und k_2 sind die Quasiimpulse der Teilsysteme, je nach System kann dies 0D (z.B. Quantenpunkt), 1D (z.B. Nanowire, Carbonnanoröhre) oder 2D (z.B. Quantenwell oder molekulär dünne Strukturen wie Graphen, TMDC) oder 3D (Volumen Halbleiter).

k ist im Prinzip ein kontinuierlicher Index, in der Praxis wird eine diskrete Anzahl von Punkten N verwendet z.B.

Also je nach Dimension d haben wir N^d verschiedene Zustände $\Rightarrow \langle a_{-k_1}^\dagger, a_{k_2} \rangle$
 $\rightarrow 4 \cdot N^{2d}$ Elemente!



Das kann sehr viel sein!

Lösungen

1) räumlich homogenitäts Annahme: Annahme $\langle a_{-k_1}^\dagger, a_{k_2} \rangle = \delta_{k_1, k_2} \langle a_{-k_1}^\dagger, a_{k_2} \rangle$
 $\Rightarrow 4 \cdot N^d$ Elemente!

2.) Isotropie Annahme