## Fortsetzg Lösungsstrategie Korrelationsentwicklung

1) räumliche Homogenitäts Annahme:

$$\langle a^+_{\lambda k} a_{\lambda k'} \rangle = \delta_{kk'} \langle a^+_{\lambda k} a_{\lambda k} \rangle \quad 4N^d \text{ Elemente}$$

2.) Isotropie Annahme: Annahme $\langle a^+_{\lambda k} a_{\lambda' k'} \rangle$
hängt nicht von der Richtung ab: 4N Elemente!

Das geht nur falls auch $\varepsilon_{\lambda k}$ nicht von der Richtung abhängt (ggf. nähern!)

Achtung nicht so einfach wie es scheint

$$\partial_t \langle a^+_{ck} a_{vk} \rangle = \dots + i\Omega \sum_{\tilde{k} q} V_q \langle a^+_{c k+q} a^+_{\lambda \tilde{k}-q} a_{\lambda \tilde{k}} a_{vk} \rangle$$

z.B. in 2D ist $\tilde{k}$ immer noch zweidimensional...

Wie berechnet man das?

### 1 Schritt (Beispiel für 2D)

$$\sum_{\tilde{k} q} V_q \langle a^+_{c k+q} a^+_{\lambda \tilde{k}-q} a_{\lambda \tilde{k}} a_{vk} \rangle = \sum_{\tilde{k} q \neq 0} V_q \big( \langle a^+_{c k+q} a_{vk} \rangle \langle a^+_{\lambda \tilde{k}-q} a_{\lambda \tilde{k}} \rangle - \langle a^+_{c k+q} a_{\lambda \tilde{k}} \rangle \langle a^+_{\lambda \tilde{k}-q} a_{vk} \rangle + \delta \langle \dots \rangle \big)$$

Weglassen für das Beispiel

$$= \sum_{\tilde{k} q \neq 0} V_q \big( \underbrace{\delta_{q,0}}_{=0} \langle a^+_{ck} a_{vk} \rangle \langle a^+_{\lambda \tilde{k}} a_{\lambda \tilde{k}} \rangle - \delta_{k+q\,\tilde{k}} \langle a^+_{c k+q} a_{\lambda k+q} \rangle \langle a^+_{\lambda k} a_{vk} \rangle \big)$$

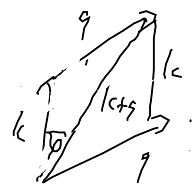
$$= - \sum_{q \neq 0} V_q \langle a^+_{c k+q} a_{\lambda k+q} \rangle \langle a^+_{\lambda k} a_{vk} \rangle$$

Summe in Integral umwandeln

$$= -\frac{L}{(2\pi)^2}\int d^2q\, V_q \langle a^\dagger_{c\,k+q}\, a_{\lambda\,k+q}\rangle \langle a^\dagger_{\lambda k}\, a_{v k}\rangle$$

$$\boxed{\sum_q = \sum_q \frac{(\Delta q)^d}{(\Delta q)^d} = \left(\frac{L}{2\pi}\right)^d \int dq^d \ldots}$$

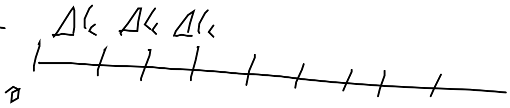
$$= \frac{L^2}{(2\pi)^2}\int dq\, q \int d\varphi\, V_q \langle a^\dagger_{c\,(k+q)(k,q,\varphi)}\, a_{\lambda\,(k+q)(k,q,\varphi)}\rangle \langle a^\dagger_{\lambda k}\, a_{\lambda k}\rangle$$




$$|k+q|^2 = |k|^2 + |q|^2 - 2|k||q|\cos(\pi-\varphi)$$

$$|k+q| = \sqrt{|k|^2 + |q|^2 - 2|k||q|\cos(\pi-\varphi)}$$

k diskretisieren




$k = n \cdot \Delta k$

$|k+q|$ kann bestimmt werden!

Entweder

$|k+q| = \lfloor m \rfloor \Delta k$

$\lfloor m \rfloor$ ist die größte ganze Zahl mit $\le m$

oder interpolieren.

$$\langle a^\dagger_{c\,|k+q|}\, a_{\lambda\,|k+q|}\rangle = (m - \lfloor m \rfloor)\langle a^\dagger_{c\,\lceil |k+q| \rceil}\, a_{\lambda\,\lceil |k+q| \rceil}\rangle + (1-(m-\lfloor m \rfloor))\langle a^\dagger_{c\,\lfloor |k+q| \rfloor}\, a_{\lambda\,\lfloor |k+q| \rfloor}\rangle$$

Dann braucht man weniger Stützstellen und es konvergiert schneller. $\Rightarrow$ Integral $\Rightarrow$ Riemann integral.

3.) Auch eine Entwicklung von $\langle a^\dagger a\rangle$ in Basisfunktionen theoretisch möglich.

<u>Bemerkung</u>

1) Zur Vektorisierung z.B. für Runge-Kutta:
Sammle alle Typen von $\langle a^\dagger a\rangle$, $\delta\langle a^\dagger a^\dagger a a\rangle$ etc.

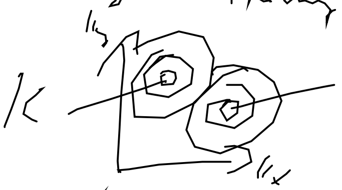
$$\underline{v} = \begin{pmatrix} \langle a^\dagger a\rangle \\ \vdots \\ \delta\langle a^\dagger a^\dagger a a\rangle \\ \vdots \end{pmatrix}$$

jeweils $\langle a^\dagger a\rangle$ mit entsprechenden Indizes und dann in den Runge-Kutta

**Rat:** Indizieren entweder über Bibliotheken z.B. für Tensor oder eine Indexfunktion anlegen!
Sonst sehr fehlerträchtiger Zugriff.

2.) Größen wie $\delta\langle abab \rangle$ ohne Näherung oder Tricks meist kaum oder garnicht rechenbar (z.B. Trion oder Biexziton)
Zu viele Elemente!
Lösungsstrategien werden wie bei Tensornetzwerkmethoden finden!

3.) Oft nur Dynamik/Rechnung in Symmetrieproblem z.B.




z.B. nur in der Nähe von $K$ und $K'$

4.) Die Diskretisierung von $k$ ($\Delta k$) muss systematisch auf Konvergenz untersucht werden.

## V.13 Stationäre Probleme, Nichtlineare Probleme SNES

### Motivation (linear)

Angenommen wir haben eine Ratengleichung
$P_n$ ist Wahrscheinlichkeit z.B. n-Level system

$$\partial_t P_n = -\underbrace{\Big(\sum_m T_{n\to m}\Big)}_{=\sum T_{n\to m}} P_n + \sum_m T_{m\to n} P_m + \underbrace{R_n}_{\text{pump Term}}$$

Eine interessante Frage, was ist die Gleichgewichtsverteilung.

Im Gleichgewicht gilt: $\partial_t P_n^{ss} = 0$

Also ist

$$0 = \partial_t P_n^{ss} = -\Big(\sum_m T_{n\to m}\Big) P_n^{ss} + \sum_m T_{m\to n} P_m^{ss} + R_n$$

als Bestimmungsgl.. In Matrixform:

$$0 = \underline{\underline{\Gamma}} \cdot \underline{\rho} + \underline{R}$$

also $\quad \underline{R}' = \underline{\underline{\Gamma}} \cdot \underline{\rho}$ ist die Lösung eines linearen Gleichungssystems um die Gleichgewichtswerte zu erhalten

Achtung! 1) Das Problem kann z.B. nicht eindeutig bestimmt sein, + Nebenbedingungen in Matrix einbauen!
Hier muss z.B. $\sum_n \rho_n = 1$ in $\Gamma$ eingebaut sein.

2.) Die Lösung kann unphysikalisch sein!
Das muss auch ausgeschlossen werden! (z.B. negative Dichte)

3.) Nicht immer ist der Ansatz mit
$\partial_t \rho_{ss} = 0$ korrekt

Beispiel: Polarisation

$\partial_t \rho_{12} = i\omega_{12} \rho_{12} + \ldots \Leftarrow$ weitere Terme $\quad E e^{i\omega_L t}$

Hier schwingt $\rho_{12}$

Dann ist $\partial_t \rho_{12} = 0$ nicht sinnvoll. Statt dessen $\tilde{\rho}_{12} = \rho_{12} e^{-i\omega_L t}$
und schreibe Gleichung auf $\tilde{\rho}_{12}$ um und setze $\partial_t \tilde{\rho}_{12} = 0$
Merke: verwende die korrekte physikalische Größe für steady state

4.) Selbst noch kann das Problem mit Standardverfahren für lin. Gleichungen.

## Motivation (nichtlinear)

z.B. wieder Blochgleichungen

$$\partial_t p_k = \frac{1}{\hbar}\left(\varepsilon_{v,k} - \varepsilon_{c,k} + i\gamma\right) p_k + \frac{i}{\hbar}\left(\sum_{q\neq 0} V_q \left(f_{c,k+q} - f_{v,k+q}\right)\right) p_k$$

$$+ \frac{i}{\hbar}\left(d_{vc}\cdot E(t) + \sum_{q\neq 0} V_q\, p_{k+q}\right)\left(n_{c,k} - n_{v,k}\right)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} n_{c/v} = 2\,\mathrm{Im}\left(\left(d_{vc}\, E(t) + \sum_{q\neq 0} V_q\, p^{*}_{k+q}\right) p_k\right)$$

$+$ Terme der Form $n_1 n_2 (1-n_2)(1-n_4)$

$\Rightarrow$ Nichtlinearität, das Gleichgewicht bekommen wir über:

$$\underline{F}(\underline{x}) = \underline{b}$$

$\Rightarrow$ allgem. $\underline{r}(\underline{x}) = \underline{F}(\underline{x}) - \underline{b}$

Wieder wäre eine Anwendung, ein Gleichgewichtszustand zu finden, der dann gestört wird (Zeitpropagation)

Jetzt Diskussion Lösungsverfahren.

Literatur: Siam Review 57(4), 535-565 (2015)