

Fortsetzung Lösungsstrategie Korrelationsentwicklung

1) räumliche Homogenitäts Annahme:

$$\langle a_{jk}^+ a_{jk'} \rangle = \delta_{kk'} \langle a_{jk}^+ a_{jk} \rangle \quad 4N \text{ Elemente}$$

2.) Isotropie Annahme: Annahme $\langle a_{jk}^+ a_{jk'} \rangle$

hängt nicht von der Richtung ab: $4N$ Elemente!

Das setzt nur falls auch ϵ_{jk} nicht von der Richtung abhängt (vgl. Näher!) abhängt

Achtung nicht so einfach wie es scheint

$$d_t \langle a_{ck}^+ a_{vk} \rangle = \dots + i \sum_{k \neq q} V_q \langle a_{ck+q}^+ a_{k-q}^+ a_{k-q} a_{vk} \rangle$$

z.B. in 2D ist t immer noch zwei dimensional...

Wie berechnet man das?

1 Schritt (Beispiel für 2D)

$$\sum_{k \neq q} V_q \langle a_{ck+q}^+ a_{k-q}^+ a_{k-q} a_{vk} \rangle = \sum_{k \neq q \neq 0} V_q (\langle a_{ck+q}^+ a_{vk} \rangle \langle a_{k-q}^+ a_{k-q} \rangle - \langle a_{ck+q}^+ a_{k-q} \rangle \langle a_{k-q}^+ a_{vk} \rangle + \delta \langle \dots \rangle)$$

$$= \sum_{k \neq q \neq 0} V_q (\delta_{q,0} \langle a_{ck}^+ a_{vk} \rangle \langle a_{k-q}^+ a_{k-q} \rangle - \delta_{k+q,k} \langle a_{ck+q}^+ a_{k+q} \rangle \langle a_{k-q}^+ a_{vk} \rangle)$$

$$= - \sum_{q \neq 0} V_q \langle a_{ck+q}^+ a_{k+q} \rangle \langle a_{k-q}^+ a_{vk} \rangle$$

Summe in Integral umwandeln

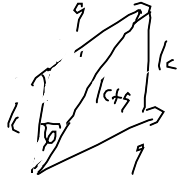
$$= -\frac{L}{(2\pi)^2} \int d^2 q V_q \langle a_c^\dagger | k+q \rangle \langle a_c | k \rangle \langle a_c^\dagger | k \rangle \langle a_c | k \rangle$$

$$= \frac{L^2}{(2\pi)^2} \int d^2 q \int d^4 y V_q \langle a_c^\dagger | (k+q)(k, y, \varphi) \rangle \langle a_c | (k+q)(k, y, \varphi) \rangle$$

$$\langle a_c^\dagger | k \rangle \langle a_c | k \rangle$$

$$\Sigma = \sum_q \frac{(A_q)^d}{(\Delta q)^d}$$

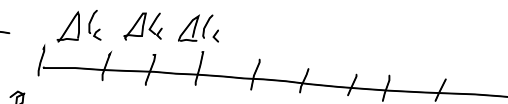
$$= \left(\frac{L}{2\pi}\right)^d \int d^d q \dots$$



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

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

k diskretisierung



$|k+q|$ kann bestimmt werden!

$$k = n \cdot \Delta k$$

Entweder

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

$\lfloor m \rfloor$ ist die größte ganze Zahl mit $\leq m$
oder interpolieren.

$$\langle a_c^\dagger | k+q \rangle \langle a_c | k+q \rangle = (m - \lfloor m \rfloor) \langle a_c^\dagger | \lfloor m \rfloor \Delta k \rangle \langle a_c | \lfloor m \rfloor \Delta k \rangle$$

$$+ (1 - (m - \lfloor m \rfloor)) \langle a_c^\dagger | \lfloor m+1 \rfloor \Delta k \rangle \langle a_c | \lfloor m+1 \rfloor \Delta k \rangle$$

Dann braucht man gewisse Stützstellen und so konvergiert schneller. \Rightarrow Integral \Rightarrow Riemann Integral.

3.) Auch die Entwicklung von $\langle a_c \rangle$ in Basisfunktionen theoretisch möglich.

Bemerkung

1) Zur Vektorisierung z. B. für Ring-Kette:

Sammle alle Typen von $\langle a \rangle$, $\delta \langle a \rangle$, $\delta \langle a \rangle \delta \langle a \rangle$ etc.

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

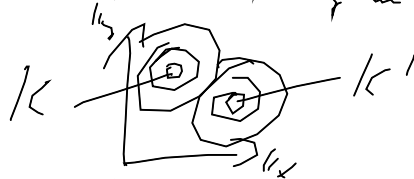
Jeweils $\langle a \rangle$ mit entsprechendem Index und dann in der Ring-Kette

Rad: Indizes entweder über Bibliotheken z.B. für Tensor
oder wie Indexfunktion anlegen!
Sonst sehr fehlerträchtige Zugriffe.

2.) Größen wie δ (atata) ohne Notwendigkeit oder Tricks
meist kann oder gar nicht reduziert werden (z.B. Trigon oder Bioricity)
Zu viele Elemente!

Lösungsstrategien werden wie bei Tensorwerkzeilmethode
finden!

3.) Oft nur Dynamik/Reduzierung in Symmetrieprobleme z.B.



z.B. nur in der Nähe von k und k'

4) Die Diskretisierung von k (Δk) muss systematisch
auf Konvergenz untersucht werden.

V.13 Stationäre Probleme, Nichtlineare Probleme SPES

Motivation (linear)

Angenommen wir haben eine Rategleichung

P_n ist Wertesdenklichkeit z.B. n -Zustandssystem

$$\partial_t P_n = - \left(\sum_m T_{n \rightarrow m} \right) P_n + \sum_m T_{m \rightarrow n} P_m + \underbrace{R_n}_{\text{pump } T_m} = \sum_m T_{m \rightarrow n}$$

Eine interessante Frage, was ist die Gleichgewichtverteilung.

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

Also ist

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

als Bestimmungsgl. in Matrixform:

$$0 = \underline{T} \cdot \underline{p} + \underline{K}$$

allg. $\underline{R} = \underline{T} - \underline{p}$ ist die Lösung eines linearen Gleichungssystems um die Stückgewichtswerte zu erhalten

- Achtg.!
- 1) Das Problem kann z.B. nicht eindeutig bestimmt sein + Nebenbedingungen in Matrix einbauen!
Hier muss z.B. $\sum_n p_n = 1$ in T eingesetzt sein.
 - 2.) Die Lösung kann unphysikalisch sein!
Das muss auch angestrichen werden! (z.B. negative Dichte)
 - 3.) Nicht immer ist der Ansatz mit $\partial_t p_{ij} = 0$ korrekt

Beispiel: Polarisat

$$\partial_t p_{12} = i \omega_m p_{12} + \dots \quad \left\{ \begin{array}{l} \text{Wachstum} \\ E \propto i \omega_m t \end{array} \right.$$

Hier hängt p_{12}

Das ist $\partial_t p_{12} = 0$ nicht sinnvoll. Stattdessen $\widehat{p}_{12} = p_{12} e^{-i \omega_m t}$

und setzen $\partial_t \widehat{p}_{12}$ auf \widehat{p}_{12} um und setzen $\partial_t \widehat{p}_{12} = 0$

Merke verwenden die korrekte physikalische Größe für ∂_t statt ∂_t

- 4.) Jetzt wird kein das Problem mit Standardwerten für lin. Stücke.

Motivation (nicht linear)

z.B. wieder Blockleiter

$$\partial_t P_k = \frac{1}{\hbar} (\Sigma_{k,k} - \Sigma_{k,k} + i\gamma_k) P_k + \frac{i}{\hbar} \left(\sum_{\xi \neq 0} V_\xi (A_{k,k+\xi} - A_{k,k-\xi}) \right) P_k$$

$$+ \frac{i}{\hbar} \left(d_{k,c} \cdot F(t) + \sum_{\xi \neq 0} V_\xi P_{k+\xi} \right) (n_{c,1/2} - n_{k,1/2})$$

$$\frac{\partial}{\partial t} n_{c,1/2} = 2 \operatorname{Im} \left(d_{k,c} F(t) + \sum_{\xi \neq 0} V_\xi P_{k+\xi} \right) P_k$$

$$+ \operatorname{Im} \left(\frac{d_{k,c}}{T_{\text{form}}} n_1 n_2 (1-n_2)(1-n_1) \right)$$

\Rightarrow Nichtlinearität, das Gleichgewicht bekommen wir über

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

$$\Rightarrow \text{also } \underline{v}(\underline{x}) = \underline{F}(\underline{x}) - \underline{b}$$

Wieder ~~te~~ wäre ^{eine} Anwendung, ein Gleichgewichtszustand zu finden, der dann gestört wird (Zeitpropagiert)

Jetzt Discussie Lösungsverfahren.

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