

Arbeit zur Erlangung des akademischen Grades  
Master of Science

# Diskontinuierliche Galerkin Methoden zur Lösung der Liouville-von-Neumann-Gleichung

Matthias Jaeger  
geboren in Würselen

15. Januar 2020

Lehrstuhl für Hochfrequenztechnik  
Fakultät Physik  
Technische Universität Dortmund



Erstgutachter: Prof. Dr. Manfred Bayer  
Zweitgutachter: Apl.-Prof. Dr. Dirk Schulz  
Abgabedatum: 15. Januar 2020



# Inhaltsverzeichnis

<b>Abkürzungsverzeichnis</b>	<b>vi</b>
<b>Symbolverzeichnis</b>	<b>vii</b>
<b>1 Einleitung</b>	<b>1</b>
<b>2 Physikalische Problemstellung</b>	<b>3</b>
2.1 Dichteoperator . . . . .	3
2.2 Reduzierter Dichteoperator . . . . .	4
2.3 Modellierung . . . . .	7
2.4 Dynamik . . . . .	10
2.5 Weitere Verfahren . . . . .	20
<b>3 Diskretisierung</b>	<b>23</b>
3.1 Übersicht . . . . .	23
3.2 Einführung in die Discontinuous-Galerkin-Methoden . . . . .	26
3.3 Discontinuous-Galerkin-Verfahren für die Liouville-von-Neumann-Gleichung . . . . .	29
<b>4 Ergebnisse</b>	<b>52</b>
4.1 Notation . . . . .	53
4.2 Test für ein analytisch lösbares Randwertproblem . . . . .	55
4.3 Observablen der stationären Lösung . . . . .	56
4.4 Konvergenzordnung der stationären Lösung . . . . .	64
4.5 Transiente Lösung . . . . .	66
<b>5 Zusammenfassung</b>	<b>69</b>
<b>A Anhang</b>	<b>72</b>
A.1 Ortsbasis . . . . .	72
A.2 Integration der Fermi-Dirac-Statistik . . . . .	72
A.3 Chemisches Potential . . . . .	73
A.4 Hartree-Potential . . . . .	74
A.5 Herleitung der Driftmatrix . . . . .	77
<b>Literatur</b>	<b>78</b>

## Abkürzungsverzeichnis

<b>CAP</b>	complex absorbing potential
<b>CG</b>	Continuous-Galerkin
<b>DG</b>	Discontinuous-Galerkin
<b>DGL</b>	Differentialgleichung
<b>FD</b>	Finite-Differenzen
<b>FEM</b>	Finite-Elemente-Methode
<b>FV</b>	Finite-Volumen
<b>LNG</b>	Liouville-von-Neumann-Gleichung
<b>NEGF</b>	nonequilibrium Green's function
<b>PDG</b>	partielle Differentialgleichung
<b>QTBM</b>	Quantum-Transmitting-Boundary-Methode
<b>RK</b>	Runge-Kutta Verfahren
<b>RTD</b>	resonante Tunneldiode
<b>TM</b>	Transfermatrix-Methode

## Symbolverzeichnis

$a(u, v), a_{\mathcal{T}}(u, v)$	Bilinearform, s. Gl. (3.1)
$B(x, y, t)$	Driftoperator nach Gl. (2.22)
$C^n(\Omega)$	Raum der $n$ -mal stetig differenzierbaren Funktionen
$d$	Dimension
$D^k$	Element (oder auch Zelle) der Triangulierung $\mathcal{T}$
$D_X$	Definitionsmenge des Ortsoperators, s. Kapitel A.1
$e$	Elementarladung, je nach Kontext auch Kante eines Elements $D^k$
$e^\alpha$	Fehler, s. Gl. (4.1)
$E$	Energie
$f(v(x, t))$	Flussfunktion, s. Gl. (3.17)
$f_{(1)}(k, r, t)$	Wigner-Funktion, s. Gl. (2.23)
$g(x, t)$	Randbedingungen für die diagonalisierte LVN, s. Gl. (3.18)
$h_k, h_y$	Gitterabstände für $x$ - und $y$ -Diskretisierung
$j$	Stromdichte in der Einheit Stromstärke/Länge <sup>2</sup>
$k$	Wellenzahl, korrespondierend zu $y$
$G$	Transformierter Driftoperator, s. Gl. (3.15)
G1, G2	Zwei Methoden zur Diskretisierung des Driftterms, s. Gl. (3.36)
$H$	Je nach Kontext Hilbert- oder Sobolevraum
$I$	Referenzelement $[-1, 1]$ des DG-Verfahrens
$k_B$	Boltzmann-Konstante
$K_x$	# Elemente in $x$ -Richtung bzgl. der DG-Diskretisierung
$K_y$	# Elemente in $y$ -Richtung bzgl. der FV-Diskretisierung
$\ell_i$	nodale Basisfunktion, s. Gl. (3.31)
$\ell_{\mathcal{T}}$	rechte Seite des diskretisierten Variationsproblems, s. Gl. (3.4)
$L_D$	Ausdehnung des Spannungsabfalls (s. Abbildung 2.2)
$L^p$	Raum der $p$ -fach integrierbaren Funktionen (auch Lebesgue-Raum)
$L_x$	Laterale Ausdehnung des Rechengebietes in $x$ -Richtung
$L_y$	Laterale Ausdehnung des Rechengebietes in $y$ -Richtung
$L_1$	Abstand der Potentialbarrieren (s. Abbildung 2.2)
$L_2$	Breite der Potentialbarrieren (s. Abbildung 2.2)

$m$	Effektive Masse der Elektronen in GaAs
$m_e$	Elektronenmasse
$M, M^k$	Massematrix, s. Def. 3.3.2
$n$	Elektronendichte in der Einheit $1/\text{Länge}^3$
$\hat{n}$	nach außen zeigender Normalenvektor
$N$	Polynomgrad für die DG-Diskretisierung
$N_D$	Donatorkonzentration des GaAs
$N_p$	Anzahl Knotenpunkte bzgl. $x$ -Diskretisierung, $N_p = N + 1$
$P_n$	Legendre Polynom
$q$	Relativkoordinate, später mit $y$ bezeichnet, s. Gl. (2.15)
$r$	Koordinate auf dem Referenzelement, $r \in I$
$r_{\mathcal{T},i/}$	Fehlerrate, s. Gl. (4.2)
$s$	Schwerpunktcoordinate, später mit $x$ bezeichnet, s. Gl. (2.15)
$S$	Steifigkeitsmatrix, s. Def. 3.3.2
$R$	Unitäre Matrix, die aus den Eigenvektoren des Ableitungsoperators besteht, s. Gl. (3.13)
$t$	Zeitcoordinate
$T$	Temperatur
$u(x, y, t)$	exakte Lösung der LVN (3.10), entspricht der reduzierten Dichtematrix, s. Gl. (2.17)
$u_{\mathcal{T}}$	Ritz-Approximation an die exakte Lösung $u$ , s. Gl. (3.4)
$U$	Spannung
$v(x, t)$	exakte Lösung der diagonalisierten LVN (3.16), Vektor der Länge $K_y$
$v_{\mathcal{T}}$	Ritz-Approximation an die exakte Lösung $v$ , s. Gl. (3.4)
$V(x, t)$	Gesamtpotential, s. Gl. (2.10)
$V_H(x, t)$	Hartree-Potential, s. Kapitel A.4
$V_s(x, t)$	Heterostuktur-Potential
$V_0$	Differenz der Leitungsbandkantenenergien zw. GaAs und AlGaAs
$W(y)$	CAP, s. Gl. (2.32)
$W_0$	Stärke des CAP, s. Gl. (2.32)
$W_p^k(\Omega)$	Sobolev-Raum, s. Gl. (3.3)
$x$	üblicherweise die einheitenfreie Schwerpunktcoordinate für die LVN
$X$	Banach-Raum, in dem die exakte Lösung $u$ zu suchen ist, s. Gl. (3.1)
$X_{\mathcal{T}}$	endlich-dimensionaler Teilraum von $X$
$y$	üblicherweise die einheitenfreie Relativkoordinate für die LVN



---

$\mathcal{G}^{k,jm}$	Driftmatrix, s. Def. 3.3.2
$\mathcal{L}$	Liouvilleoperator, s. Gl. (2.16)
$\mathcal{P}_N$	Raum der Polynome der Ordnung $N$
$\mathcal{T}$	Triangulierung des Rechengebietes $\Omega_x$
$\mathcal{V}$	Vandermonde-Matrix, s. Gl. (3.33)
$\alpha$	Verfeinerungsindex für $K_x$ gemäß $K_x^\alpha = 2^\alpha$
$\beta$	$1/(k_B T)$
$\Gamma$	Rand des Rechengebietes $\Omega$
$\Gamma_D$	Der Teil des Randes $\Gamma$ , für den Dirichlet-Randbedingungen bekannt sind
$\delta$	Einflussbereich des CAP, s. Gl. (2.32)
$\kappa$	Strafparameter des numerischen Flusses, s. Gl. (3.24)
$\lambda, \lambda_j$	Einer der Eigenwerte $\Lambda$
$\Lambda$	Eigenwerte des diskretisierten Ableitungsoperators, s. Gl. (3.12)
$\mu$	Chemisches Potential, s. Kapitel A.3
$\xi$	Längenskala nach Gl. (4.3)
$\xi_i$	Nodale Knotenpunkte, s. Gl. (3.31)
$\hat{\rho}$	Dichteoperator, s. Gl. (2.3)
$\hat{\rho}_{(1)}$	reduzierter Dichteoperator, s. Gl. (2.4)
$\rho_{(1)}(x, y, t)$	Dichtematrix, s. Gl. (2.11)
$\tau$	Zeitskala nach Gl. (4.3)
$\Phi_n$	modale Basisfunktion, s. Gl. (3.32)
$\Psi$	Wellenfunktion
$\Omega$	Rechengebiet, es gilt $\Omega = \Omega_x \times \Omega_y$
$\Omega_x$	Rechengebiet bzgl. $x$ -Richtung mit $\Omega_x = (-L_x/2, L_x/2)$
$\Omega_y$	Rechengebiet bzgl. $y$ -Richtung mit $\Omega_y = [-L_y/2, L_y/2]$
$\llbracket v \rrbracket, \{v\}$	Sprung und Mittelwert, s. Def. 3.3.1
$\underline{v}, \underline{v}_j, \underline{v}_j^k$	Koeffizientenvektor, s. Def. 3.3.2



# 1 Einleitung

Die numerische Simulation elektrodynamischer Quantenprozesse gilt als wesentliche Voraussetzung zur Entwicklung ultraschneller elektrischer Bauteile. Die physikalische Grundlage bildet dabei die Quantenstatistik. Unter vereinfachenden Annahmen an das zu untersuchende System können numerisch lösbare Gleichungen abgeleitet werden.

Ziel dabei ist es, die experimentellen Ergebnisse für bestimmte Bauelemente zumindest ansatzweise korrekt zu beschreiben, um daraus Vorhersagen für weitere Strukturen mit beispielsweise geänderter Materialkomposition zu treffen. Als Referenz dient dabei in dieser Arbeit die resonante Tunneldiode (RTD), welche auch detailliert in der Literatur [1] beschrieben ist.

Eine solche Struktur lässt sich als offenes System beschreiben [2]. Es findet ein Austausch von lokal erhaltenen Fermionen – die Erhaltung wird durch eine lokale Kontinuitätsgleichung beschrieben – mit der Umgebung statt. Letztere besteht dabei aus zwei Teilchen-Reservoirs. Das zu untersuchende System besitzt eine endliche Ausdehnung im Raum. Es muss im Fall einer angelegten Spannung folglich ein Strom durch die Oberfläche als Rand des Systems fließen. Diese Arbeit beschränkt sich auf eindimensionale Quantenstrukturen, für die also die interessante Physik in einer Dimension stattfindet. Dabei soll der Strom der Teilchen, also der quantenmechanische Transport beschrieben werden. Dies geschieht allgemein in verschiedenen Anwendungsfällen (Hydrodynamik, Aerodynamik, Elektronik, Neutronentransport, usw.) mit Hilfe einer die Dynamik beschreibenden Differentialgleichung. Verschiedene Herangehensweisen führen dabei zu verschiedenen Gleichungen, wie die Liouville-von-Neumann-Gleichung (LNG) oder die Wigner-Gleichung.

Viele Methoden zur Lösung der LNG (beispielsweise in [3],[4]) sowie der Wigner-Gleichung (beispielsweise in [5],[6],[7]) sind in der Literatur untersucht worden. Es stellt sich die Frage: Wozu ein weiteres Verfahren?

Statt nun mögliche Nachteile der gängigen Verfahren zu nennen, soll eine physikalische Motivation für das Discontinuous-Galerkin (DG)-Verfahren gegeben werden, welches in dieser Arbeit auf die LNG angewandt wird. Im Ortsraum ist die Einteilchen-Dichtematrix  $\rho(r, r')$  diejenige Observable, aus der sich anschaulichere Observablen wie Strom und Teilchendichte ergeben. Sie enthält vollständige, quantenmechanische Information. Eine Koordinatentransformation hin zu Schwerpunkt- und Relativkoordinaten, gefolgt von einer Fouriertransformation bezüglich der Relativkoordinate führt auf den Wigner-Formalismus. Die Relativkoordinate kann dann als klassischer Impuls  $p$  des Teilchens aufgefasst werden. Die LNG geht im Wigner-Formalismus in die Wigner-Gleichung über. Multiplikation mit 1 bzw.  $p$  und

anschließende Integration dieser Gleichung liefert Erhaltungsgleichungen für Teilchen bzw. Strom, siehe auch [8]. Dasselbe Verhalten soll für die LNG im Ortsraum nachgebildet werden, denn im Wigner-Formalismus gestalten sich die nicht-lokalen Faltungsintegrale für den Potentialterm numerisch aufwändig [7].

Integration der LNG über die Relativkoordinate liefert eine analoge Erhaltungsgleichung. Die Idee ist nun, bezüglich der Schwerpunktkoordinate ein numerisches Verfahren anzuwenden, das für eben solche Probleme entwickelt worden ist, nämlich das DG-Verfahren.

Diese Methoden beinhalten stets die Definition des sogenannten numerischen Flusses. Es ist eine weitere Motivation, dass durch die Wahlmöglichkeit dieses Flusses sowie auch der Ordnung der Polynomapproximation Flexibilität entsteht, wodurch mögliche Probleme anderer Verfahren behoben werden könnten. Insbesondere für höherdimensionale Probleme bieten die DG-Verfahren als Teilmenge der Finite-Elemente-Methode (FEM) den Vorteil einer flexiblen Triangulierung. Bereiche, in denen beispielsweise starke Änderungen des Potentials auftreten, können losgelöst sehr fein diskretisiert werden. Die Frage, inwieweit die beschriebenen Vorteile tatsächlich realisiert werden können, soll Gegenstand der Arbeit sein. Ein letzter ganz praktischer Aspekt ist darin zu sehen, dass bis heute nach Kenntnis des Autors keine Arbeiten vorliegen, welche die DG-Verfahren mit der LNG in Zusammenhang bringen.

## 2 Physikalische Problemstellung

Die Dynamik des betrachteten Quantensystems wird mit Hilfe der LNG beschrieben. Sie bedient sich dem aus der Quantenstatistik bekannten Konzept des Dichteoperators für ein physikalisches System. Daher wird zunächst der Dichteoperator eingeführt. Eine alternative Formulierung der Dynamik folgt aus einer Fourier-Transformation bezüglich der Relativkoordinate und führt auf den sog. Wigner-Formalismus. Etliche Veröffentlichungen ([5],[6],[7],[9],[10] usw.) betreffen die Implementierung dieser sogenannten Wigner-Gleichung. Daher wird auf Unterschiede und Schwierigkeiten insbesondere hinsichtlich der Randbedingungen eingegangen. In der vorliegenden Arbeit verbleibt jedoch der Fokus auf der Ortsraumformulierung. Abschließend werden alternative Verfahren genannt und die Einordnung selbiger in den physikalischen Kontext.

### 2.1 Dichteoperator

Aus Sicht des Entwicklers elektronischer Bauelemente ist es naheliegend, nach der Elektronendichte  $n(\mathbf{r})$  sowie der Stromdichte  $j(\mathbf{r})$  des Systems zu fragen. Quantenmechanisch sind diese Größen Observablen, also Erwartungswerte hermitescher Operatoren bezüglich des Hilbertraums der  $L^2$ -Funktionen. Anschaulich ist klar, dass sich die Elektronendichte aus zwei Wahrscheinlichkeiten zusammensetzt. Erstens wird die Wahrscheinlichkeit dafür benötigt, dass ein Zustand mit Energie  $\epsilon$  besetzt ist. Diese wird mit der Aufenthaltswahrscheinlichkeit, dass am Ort  $\mathbf{x}$  überhaupt ein Teilchen vorhanden ist, multipliziert. Schließlich muss über alle Energien aufsummiert werden.

Dieser intuitive Zusammenhang wird in der Quantenstatistik mit Hilfe des sogenannten Dichteoperators beschrieben. Dazu wird der Begriff des *quantenmechanischen Ensembles* benötigt. Ein Hilbertraum  $H$  sei durch eine Menge  $\{|k\rangle\}$  von Zuständen mit den Eigenschaften

- i)  $\langle k|k\rangle = 1$
- ii)  $\{|k\rangle\}$  vollständig, dh.  $|\Psi\rangle = \sum_k \alpha_k |k\rangle \quad \forall |\Psi\rangle \in H \text{ und } |k\rangle \in \{|k\rangle\}$

definiert. Da die Orthogonalität der  $|k\rangle$  nicht gefordert ist, ist das System eventuell übervollständig. Ein Ensemble besteht nun aus einer großen Anzahl von Kopien des Systems, jede präpariert in einem der Zustände  $|k\rangle$ . Es bezeichne  $w_k$  den Bruchteil der Kopien im Zustand  $|k\rangle$ . Per Definition ist also  $w_k \geq 0$  und  $\sum_k w_k = 1$ .

Der Erwartungswert eines Operators  $\hat{A} : H \rightarrow H$  lässt sich nun sinnvoll schreiben gemäß

$$\langle \hat{A} \rangle = \sum_k w_k \langle k | \hat{A} | k \rangle .$$

Um diesen Erwartungswert in einer beliebigen vollständigen Orthonormalbasis  $\{|l\rangle\}$  darzustellen, wird die quantenmechanische Identität  $\hat{1} = \sum_l |l\rangle \langle l|$  eingeschoben. Dann lässt sich die Information über das Ensemble elegant in einem neuen Operator  $\hat{\rho}$ , dem sogenannten Dichteoperator separieren. Es gilt

$$\langle \hat{A} \rangle = \sum_l \sum_k w_k \langle k | \hat{A} | l \rangle \langle l | k \rangle \quad (2.1)$$

$$= \sum_l \langle l | \hat{\rho} \hat{A} | l \rangle = \text{Sp}(\hat{\rho} \hat{A}) \quad (2.2)$$

mit

$$\hat{\rho} \equiv \sum_k w_k |k\rangle \langle k| . \quad (2.3)$$

Aus der Definition der  $|k\rangle$  und der  $w_k$  folgen drei wichtige Eigenschaften.

- 1)  $\hat{\rho} = \hat{\rho}^\dagger$  hermitesch,
- 2)  $\forall \Psi \in H : \langle \Psi | \hat{\rho} | \Psi \rangle \geq 0$  positiv-semidefinit und
- 3)  $\text{Sp}(\hat{\rho}) = 1 = \langle 1 \rangle$  normiert.

Der nach Gleichung (2.3) definierte Dichteoperator enthält vollständige Information über das System. In Vielteilchensystemen ist die Berechnung infolge begrenzter Rechenkapazität jedoch nicht möglich und es werden – wie üblich in der Physik – Näherungen zur Beschreibung eines Systems benötigt. Dann ist es ausreichend, das Gesamtsystem mit Hilfe des sogenannten reduzierten Dichteoperators zu beschreiben.

## 2.2 Reduzierter Dichteoperator

Im Allgemeinen setzt sich der N-Teilchen-Hamiltonoperator aus Einteilchen-, Zweiteilchen- bis zu N-Teilchen-Operatoren zusammen, die auf den jeweiligen Unterräumen des *Fockraums*

$$H = H^1 \oplus H^2 \oplus \dots \oplus H^N$$

agieren. Wechselwirkung zwischen Teilchen setzt naturgemäß mindestens zwei Teilchen voraus, sodass Einteilchen-Operatoren ausschließlich in  $H^1$  leben. Beispiele für Einteilchenoperatoren sind kinetische Energie  $\hat{T}$ , Teilchenzahl  $\hat{N}$  oder Stromdichte  $\hat{j}$ . Die potentielle Energie eines jeden Teilchens hängt jedoch im Allgemeinen von

den Orten und Geschwindigkeiten aller Teilchen ab und ist daher ein  $N$ -Teilchen-Operator. Zur Vereinfachung dieses komplizierten Zusammenhangs wird häufig – und so auch in dieser Arbeit – eine *Mean-Field-Näherung* getroffen, wonach die wechselwirkenden Teilchen als freie Teilchen in einem externen Feld betrachtet werden. Dann enthält der Hamiltonoperator lediglich Einteilchen-Operatoren  $\hat{A}_{(1)}$ .

Erwartungswerte werden erneut nach Formel (2.2) errechnet. Es ist nun jedoch sinnvoll, die Spur in der Besetzungszahl-Basis zu notieren. Dazu werden Orts- und Impulseigenzustände (vgl. Anhang A.1) als Basis des Fockraums eingeführt gemäß

$$\begin{aligned} |r_a, r_b, \dots, r_l\rangle &\equiv |r_a\rangle_1 |r_b\rangle_2 \times \dots \times |r_l\rangle_N && \text{Orts-eigenzustände} \\ |k_a, k_b, \dots, k_l\rangle &\equiv |k_a\rangle_1 |k_b\rangle_2 \times \dots \times |k_l\rangle_N && \text{Impuls-eigenzustände,} \end{aligned}$$

wobei die  $r_i$  bzw.  $k_i$  auch den Spin beinhalten und im Falle von Fermionen wegen des Pauli-Prinzips stets  $r_i \neq r_j$  bzw.  $k_i \neq k_j$  für  $i \neq j$  gilt. Die Notation auf der rechten Seite ist so zu verstehen, dass das nummerierte Teilchen 2 den Ort  $r_b$  besetzt.

Der Übergang zur Besetzungszahl-Darstellung wird auch als *zweite Quantisierung* bezeichnet und ist beispielsweise in [11] erläutert. Die Basis-Zustände sind  $|n_1, n_2, \dots, n_\infty\rangle$ , wobei die  $n_\alpha$  die Anzahl Teilchen mit Quantenzahlen  $\{\alpha\}$  (zum Beispiel Spin und Impuls) bezeichnen. Im  $N$ -Teilchen System ist  $\sum_\alpha n_\alpha = N$ . Für Fermionen gilt ferner  $n_\alpha \in \{0, 1\}$ .

Da ein Einteilchenoperator nur in  $H^1$  agiert, können quantenmechanische Vollständigkeitsrelationen aus eben jenem Unterraum eingeführt werden. Dann ergibt sich für den Operator  $\hat{A}_{(1)}^N$

$$\hat{A}_{(1)}^N = \sum_{j=1}^N \hat{A}_j = \sum_{j=1}^N \sum_{k_a} \sum_{k_b} |k_a\rangle_j \langle k_a| \hat{A}_j |k_b\rangle_j \langle k_b|.$$

Für identische Teilchen kann das Matricelement von  $\hat{A}_j$  nicht von  $j$  abhängen, sodass mit  $\hat{A}_j \equiv \hat{A}$

$$\hat{A}_{(1)}^N = \sum_{k_a} \sum_{k_b} \langle k_a | \hat{A} | k_b \rangle \sum_{j=1}^N |k_a\rangle_j \langle k_b|$$

folgt. In zweiter Quantisierung  $\hat{A}_{(1)}^N \rightarrow \hat{A}_{(1)}^{nb}$  ergibt sich hieraus sowohl für Bosonen als auch Fermionen [12]

$$\hat{A}_{(1)}^{nb} = \sum_{k_a k_b} \langle k_a | \hat{A} | k_b \rangle \hat{a}_{k_a}^\dagger \hat{a}_{k_b},$$

wobei  $\hat{a}_{k_a}^{(\dagger)}$  Vernichtungs- (Erzeugungs-) operator eines Teilchens mit Impuls (und Spin)  $k_a$  ist. Durch Spurbildung in der Teilchenzahlbasis ergibt sich hieraus der Erwartungswert

$$\begin{aligned} \langle \hat{A}_{(1)}(t) \rangle &= \text{Sp} \left( \hat{A}_{(1)} \hat{\rho}(t) \right) \\ &= \sum_{\{n_\alpha\}} \sum_{k_a k_b} \langle k_a | \hat{A} | k_b \rangle \langle \{n_\alpha\} | \hat{a}_{k_a}^\dagger \hat{a}_{k_b} \hat{\rho}^{nb}(t) | \{n_\alpha\} \rangle . \end{aligned}$$

Der letzte Term entspricht dem Fockraum-Matrixelement eines Einteilchen-Dichteoperators. Die Spur hierüber wird daher als *reduzierte Dichtematrix* (in Impulsdarstellung)  $\langle k_a | \hat{\rho}_{(1)}(t) | k_b \rangle$  bezeichnet[12]:

$$\langle k_a | \hat{\rho}_{(1)}(t) | k_b \rangle = \text{Sp} \left( \hat{a}_{k_a}^\dagger \hat{a}_{k_b} \hat{\rho}^{nb}(t) \right) = \sum_{\substack{\{n_\alpha\} \\ \sum_\alpha n_\alpha = N}} \langle \{n_\alpha\} | \hat{a}_{k_a}^\dagger \hat{a}_{k_b} \hat{\rho}^{nb}(t) | \{n_\alpha\} \rangle . \quad (2.4)$$

Dieser Operator reduziert die Suche nach Erwartungswerten im riesigen  $N$ -Teilchen-Hilbertraum auf ein Problem im 1-Teilchen-Hilbertraum. Voraussetzung ist dabei, dass Zustände des  $H^1$  und des  $H^N$  separabel und damit nicht verschränkt sind – was wiederum durch die *Mean-Field-Näherung* gewährleistet wird. Das Einfügen der Vollständigkeitsrelation  $\int dr |r\rangle \langle r| = \hat{1}$  in Gleichung (2.4) führt auf die Ortsdarstellung

$$\langle \hat{A}_{(1)}(t) \rangle = \int_{D_X} dr_a \int_{D_X} dr_b \langle r_a | \hat{A} | r_b \rangle \langle r_b | \hat{\rho}_{(1)}(t) | r_a \rangle \quad (2.5)$$

mit der reduzierten Dichtematrix (in Ortsdarstellung)

$$\begin{aligned} \langle r_b | \hat{\rho}_{(1)}(t) | r_a \rangle &= \text{Sp} \left( \hat{\Psi}^\dagger(r_a) \hat{\Psi}(r_b) \hat{\rho}^{nb}(t) \right) \\ &= \sum_{\substack{\{n_\alpha\} \\ \sum_\alpha n_\alpha = N}} \langle \{n_\alpha\} | \hat{\Psi}^\dagger(r_a) \hat{\Psi}(r_b) \hat{\rho}^{nb}(t) | \{n_\alpha\} \rangle , \end{aligned} \quad (2.6)$$

wobei die Feldoperatoren  $\hat{\Psi}(r) \equiv \sum_k \langle r | k \rangle \hat{a}_k$  Verwendung finden. Der Begriff einer Matrix folgt hierbei nicht der streng mathematischen Definition, denn die  $|r\rangle$  stellen als Kontinuum eine uneigentliche Basis dar.

Um nun zum Ausgangspunkt von Kapitel 2.1 zurückzukehren, ist es sinnvoll, die Observable der Teilchenzahl  $\hat{N}$  in Formel (2.5) einzusetzen. Für Fermionen muss wegen der Definition des Orts-Eigenzustands (vgl. Anhang A.1)  $\hat{N} |r\rangle = 1 |r\rangle$  gelten.



Dann folgt

$$\begin{aligned}\langle \hat{N}(t) \rangle &= \int_{D_X} dr_a \int_{D_X} dr_b \delta(r_a - r_b) \langle r_b | \hat{\rho}_{(1)}(t) | r_a \rangle \\ &= \int_{D_X} dr \langle r | \hat{\rho}_{(1)}(t) | r \rangle = N(t) ,\end{aligned}$$

sodass die Diagonalelemente des reduzierten Dichteoperators mit der Teilchendichte  $\langle n(r, t) \rangle$  identifiziert werden können:

$$\langle n(r, t) \rangle = \langle r | \hat{\rho}_{(1)}(t) | r \rangle = \text{Sp} \left( \hat{\Psi}^\dagger(r) \hat{\Psi}(r) \hat{\rho}^{nb}(t) \right) . \quad (2.7)$$

Die Normierung ist für den reduzierten Dichteoperator offenbar eine andere als im Falle des vollständigen Dichteoperators, wo  $\text{Sp}(\hat{\rho}) = 1$  gilt. Neben der Teilchendichte lässt sich des Weiteren die elektrische Stromdichte definieren. Dazu werden üblicherweise Schwerpunkt- und Relativkoordinaten  $s$  und  $q$  eingeführt (siehe Gleichung (2.15)) und  $\tilde{u}(s, q, t) = \left\langle s + \frac{q}{2} \left| \hat{\rho}_{(1)}(t) \right| s - \frac{q}{2} \right\rangle$  gesetzt. Dann gilt [4]

$$\langle j(s, t) \rangle = e \frac{\hbar}{m} \text{Im} \{ \partial_q \tilde{u}(s, q, t) |_{q=0} \} , \quad (2.8)$$

was später in Kapitel 2.4 noch motiviert wird. Für die Berechnung von praktisch relevanten Erwartungswerten (Teilchenzahl, Stromdichte) ist also eine Projektion auf die Diagonale  $r_a = r_b$  notwendig. Es sei bereits hier angemerkt, dass die in der Literatur auftretende *hydrodynamische Näherung* diese Projektion vor der Lösung der Bewegungsgleichung durchführt [1]. Damit gehen die in der Dichtematrix enthaltenen quantenmechanischen Ortskorrelationen nicht weiter in die Rechnung ein. In der vorliegenden Arbeit wird die Projektion erst nach der Lösung der Bewegungsgleichung durchgeführt.

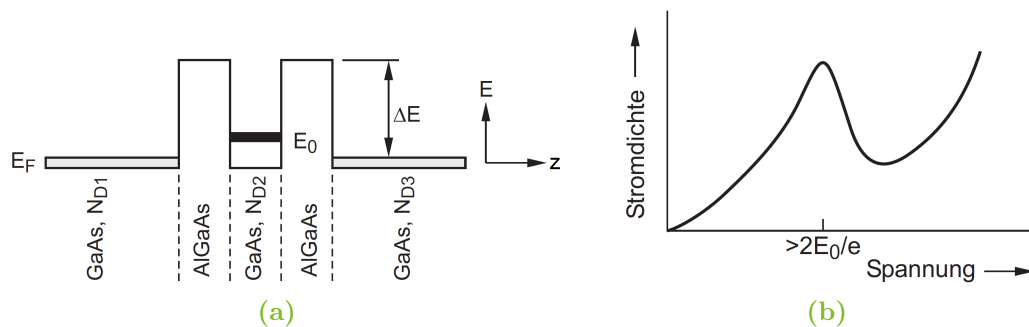
## 2.3 Modellierung

Ziel dieses Abschnittes ist es, eine *RTD* zu modellieren, sodass die bis hierhin entwickelte Theorie in einem praktischen Anwendungsfall zum Einsatz gebracht werden kann.

Eine RTD nutzt den quantenmechanischen Effekt des Tunnelns aus, weshalb letztlich ein negativer differentieller Widerstand in Teilen der Strom-Spannungs-Kennlinie festzustellen ist. Aufgebaut ist die Diode aus einer Abfolge von GaAs- und AlGaAs-Schichten, wodurch zwei Potentialbarrieren entstehen, zwischen denen sich ein Quantentopf ausbildet, siehe Abbildung 2.1a. Letzterer ist durch die Ausprägung

## 2 Physikalische Problemstellung

resonanter Energieniveaus gekennzeichnet, welche sich aus der Lösung der Schrödingergleichung ergeben (siehe auch Abschnitt 2.5.1). Entspricht die Energie der injizierten Elektronen<sup>1</sup> gerade einem der resonanten Energiewerte des Quantentopfes kommt es zum resonanten Tunneln, sodass der Stromfluss stark ansteigt. Wird die Energie weiter erhöht, bricht der Stromfluss wieder ein, da die Resonanzbedingung nicht erfüllt ist. Wie üblich wird diese Charakteristik durch thermische Energie geglättet, sodass eine Strom-Spannungs-Kennlinie wie diejenige in Abbildung 2.1b entsteht. Die RTD wird im Folgenden als offenes System modelliert, durch das also



**Abbildung 2.1** Aufbau mit Potentialverlauf (a) und Strom-Spannungs-Kennlinie einer RTD (b), [1].

Elektronen hindurchfließen können. Sie wird durch zwei Kontakte in einen Schaltkreis integriert, welche als Elektronen-Reservoir dargestellt werden. Das Modell wird nun charakterisiert durch die folgenden, vereinfachenden Anforderungen.

- (i) Innerhalb der Struktur können Elektronen weder erzeugt noch vernichtet werden.
- (ii) Elektronen können in den Reservoiren absorbiert und erzeugt werden.
- (iii) Es finden keine inelastischen Streuprozesse statt, sondern ausschließlich elastische. Daher gibt es keinerlei Energiedissipation in Form von Elektron-Phonon-Wechselwirkung. Streumechanismen können im Wigner-Formalismus mit einem Kollisions-Operator beschrieben werden, näheres ist in der Literatur [1] zu finden.
- (iv) Die Reservoir werden als ideale elektrische Kontakte angenommen. Sie gleichen in ihren Eigenschaften denen eines schwarzen Strahlers, siehe Kapitel 2.4.3. Innerhalb der Reservoir sind die Elektronen im thermischen Gleichgewicht mit konstanter Temperatur  $T = 300$  K und Fermi-Niveau. Ein Stromfluss zwischen

<sup>1</sup>Die Energie der injizierten Elektronen ist direkt gekoppelt mit der an die RTD angelegten Spannung.

Reservoir und Quantenstruktur stellt für das Reservoir eine vernachlässigbare Störung dar [13]. Physikalisch ergibt sich das ideale Reservoir, wenn die Streurate in diesem sehr hoch ist bzw. die Korrelationszeit kurz ist [13].

- (v) Die Halbleiterschichten sind unendlich ausgedehnt, sodass die Wellenfunktionen in den transversalen Schichten die Form ebener Wellen annehmen.
- (vi) Der Einfluss des zugrundeliegenden Kristallgitters, durch das sich die Elektronen bewegen, wird mit Hilfe der *effektiven Masse* beschrieben. Die effektive Masse wird in dieser Arbeit für alle Richtungen (also auch bezüglich der  $z$ -Richtung) als konstant angenommen, wohlwissend dass dies eine sehr grobe Näherung darstellt<sup>2</sup>. Insbesondere ist durch die abrupte Änderung der Bandstruktur infolge des Heteroübergangs eine  $z$ -Abhängigkeit zu erwarten.

Anforderung (iii) entspricht dem sog. kohärenten Grenzfall [14]. In diesem ist Anforderung (ii) sogar zwingend, denn sonst ließe sich ein endlicher Widerstand gemäß Abbildung 2.1b nicht erklären [15]. Anforderung (i) muss zu einer Kontinuitätsgleichung im Inneren der Struktur führen, welche bestenfalls durch ein numerisches Schema sichergestellt wird (vgl. Abschnitt 4.3).

Kohärente, stationäre Zustände lassen sich mit Hilfe der *single-band, effective-mass Schrödingergleichung* [13]

$$\begin{aligned} E\Psi(x) &= -\frac{\hbar^2}{2}\partial_x\frac{1}{m^*(x)}\partial_x\Psi(x) + V(x)\Psi(x) \\ &\approx -\frac{\hbar^2}{2m^*}\partial_x^2\Psi(x) + V(x)\Psi(x) \end{aligned} \quad (2.9)$$

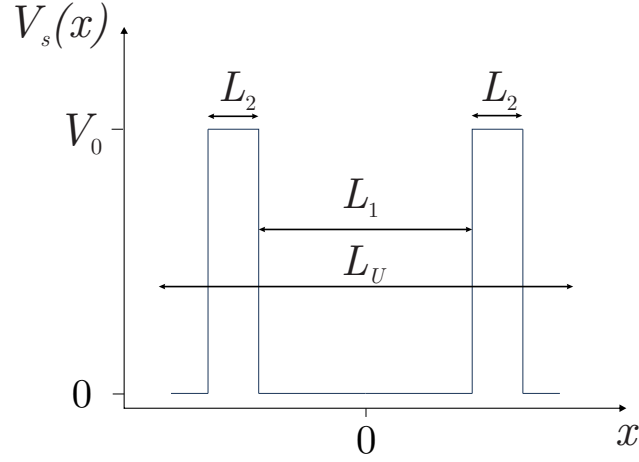
beschreiben. Hierin sind  $V(x)$  das Potential und  $m^* \approx 0,063m_e$  [16] die effektive Masse von GaAs. Das Potential beinhaltet den Potentialverlauf der Heterostruktur  $V_s(x, y, z)$  sowie das selbstkonsistente *Hartree-Potential*  $V_H(x, y, z)$  (welches das äußere Feld  $-eU$  beinhaltet):

$$V(x) = V_H(x) + V_s(x) . \quad (2.10)$$

Da das Hartree-Potential von der Konstellation der Elektronen abhängt und umgekehrt, wird es selbstkonsistent unter Berücksichtigung der *Poisson-Gleichung* berechnet, wie im Anhang A.4 erläutert wird. Der durch die Materialkomposition GaAs/AlGaAs resultierende Potentialverlauf  $V_s(x)$  ist in Abbildung 2.2 gezeigt.

Die quantenmechanische Beschreibung der Dynamik des Systems kann durch verschiedene Zugänge realisiert werden, siehe auch Kapitel 2.5. In der vorliegenden

<sup>2</sup>Der Effekt einer nicht-konstanten effektiven Masse bezüglich  $z$ -Richtung wird gegenwärtig in einer anderen Arbeit am Lehrstuhl untersucht.



**Abbildung 2.2** Potentialverlauf der RTD.

Arbeit wird dabei der Fokus auf die LNG gelegt. Wie in den vorangegangenen Kapiteln erläutert, ist mit Hilfe der Dichtematrix eine Beschreibung quantenmechanischer Ensembles, also gemischter Zustände möglich. Dieser Zugang scheint für die gewählten Anforderungen unnötig verkomplizierend zu sein, jedoch ermöglicht er eine spätere Berücksichtigung von nicht-kohärenten Wechselwirkungen [1].

## 2.4 Dynamik

Die Dynamik eines fermionischen Systems ergibt sich aus der LNG. Sie lässt sich sowohl im Ortsraum, als auch im Phasenraum formulieren. Das Augenmerk dieser Arbeit richtet sich dabei auf die Ortsraumformulierung, namentlich die LNG. Zur Vollständigkeit und zur besseren Diskussion der verschiedenen Methoden wird auch die Phasenraumformulierung vorgestellt, namentlich die Wigner-Gleichung. Das Modell für das konkrete, physikalische Problem wird dann in beiden Fällen durch die Randbedingungen beschrieben.

### 2.4.1 Liouville-von-Neumann-Gleichung

Die Dynamik der reduzierten Dichtematrix (2.6) wird mit Hilfe der von-Neumann Gleichung für den Dichteoperator  $\hat{\rho}(t)$

$$\partial_t \hat{\rho}(t) = -\frac{i}{\hbar} [\hat{H}(t), \hat{\rho}(t)]$$

hergeleitet. Es folgt nach Ausnutzen der Spurinvarianz unter zyklischem Vertauschen aus Gleichung (2.6)

$$\partial_t \underbrace{\langle r_a | \hat{\rho}_{(1)}(t) | r_b \rangle}_{\equiv \rho_{(1)}(r_a, r_b, t)} = \text{Sp} \left( [\hat{\Psi}^\dagger(r_a) \hat{\Psi}(r_b), \hat{H}] \hat{\rho}(t) \right) . \quad (2.11)$$

Die gewählte Darstellung in zweiter Quantisierung erfordert nun einen Ausdruck für den Hamiltonoperator  $\hat{H} = \hat{H}_{\text{kin}} + \hat{H}_{\text{pot}}$ . Wie bereits im vorangegangenen Kapitel erwähnt, wird an dieser Stelle eine Mean-Field-Näherung getroffen, sodass sich das Potential als äußeres Potential

$$\hat{H}_{\text{pot}} \approx \int_{D_X} dr \hat{\Psi}^\dagger(r) V(r) \hat{\Psi}(r) \quad (2.12)$$

darstellen lässt [12]. Dabei ist  $V : D_X \rightarrow \mathbb{R}$  das äußere (gemittelte) Potential. Der kinetische Anteil ist unter der Annahme  $m(r) = \text{konst.}$  durch

$$\hat{H}_{\text{kin}} = -\frac{\hbar^2}{2m} \int_{D_X} dr \hat{\Psi}^\dagger(r) \partial_r^2 \hat{\Psi}(r)$$

gegeben [12]. Unter Verwendung der fermionischen Kommutator-Relationen [12]

$$\begin{aligned} [\hat{\Psi}(r_a), \hat{\Psi}^\dagger(r_b)] &= \delta(r_a - r_b) \\ [\hat{\Psi}(r_a), \hat{\Psi}(r_b)] &= 0 \quad \text{sowie} \\ [a, bc] &= a[b, c] + b[a, c] \end{aligned}$$

folgt hieraus schließlich

$$\begin{aligned} \partial_t \rho_{(1)}(r_a, r_b, t) &= \frac{i}{\hbar} \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} (\partial_{r_a}^2 - \partial_{r_b}^2) + (V(r_a, t) - V(r_b, t)) \right\} \\ &\quad \times \text{Sp} \left( \hat{\Psi}^\dagger(r_a) \hat{\Psi}(r_b) \hat{\rho}(t) \right) \end{aligned}$$

bzw. in der bekannteren Form mit Definition (2.6) die LNG

$$i\partial_t \rho_{(1)}(r_a, r_b, t) = \underbrace{\left\{ \frac{\hbar}{2m} (\partial_{r_a}^2 - \partial_{r_b}^2) - \frac{1}{\hbar} (V(r_a, t) - V(r_b, t)) \right\}}_{\equiv \tilde{\mathcal{L}}(r_a, r_b, t)} \rho_{(1)}(r_a, r_b, t) \quad (2.13)$$

mit dem *Liouvilleoperator*  $\tilde{\mathcal{L}}(r_a, r_b, t)$ . Dieselbe Gleichung ergäbe sich für den Dichteoperator, wenn der Hilbertraum von vornherein ein Einteilchenraum wäre. Mit der vorangegangenen Herleitung gelingt jedoch eine allgemeinere Formulierung, die

auf die entscheidende Annahme (Gleichung (2.12)) hinweist. Weiterführende Arbeiten könnten an dieser Stelle beispielsweise Zweiteilchen-Wechselwirkungen mit einbeziehen.

Zur Untersuchung der LNG werden zwei Fälle unterschieden, worauf im Folgenden referenziert werden wird:

- Der *stationäre Fall* mit  $\partial_t \rho_{(1)}(r_a, r_b, t) = 0$ . Hier gilt  $[\hat{\rho}, \hat{H}] = 0$ .
- der allgemeinere *transiente Fall*  $\partial_t \rho_{(1)}(r_a, r_b, t) \neq 0$ .

Wie im vorangegangenen Kapitel erwähnt, wird im Folgenden freie-Teilchen-Näherung in  $x$ - und  $y$ - Richtung angenommen. Dann lässt sich mit  $\lambda^2 = \hbar^2/2mk_B T$  die Dichtematrix separieren [17] gemäß

$$\rho(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \rho(z, z') \exp\left(\frac{(x - x')^2 + (y - y')^2}{4\lambda^2}\right). \quad (2.14)$$

Der Fokus liegt also auf einem Modell unabhängiger Elektronen in einer Dimension, sodass es genügt, die Einteilchen-Dichtematrix  $\rho(z, z')$  zu betrachten. Aufgrund der Struktur der Gleichung ist es sinnvoll, Schwerpunkt- und Relativkoordinaten

$$\begin{aligned} s &\equiv \frac{r_a + r_b}{2} & q &\equiv r_a - r_b \\ \Leftrightarrow \quad r_a &= s + \frac{q}{2} & r_b &= s - \frac{q}{2} \end{aligned} \quad (2.15)$$

einzuführen. Diese Koordinatendrehung erfordert es, das Potential  $V(x)$  auch außerhalb von  $[-L/2, L/2]$  auszuwerten. Hierfür wird

$$V(x > L/2) = V(L/2) \quad \text{bzw.} \quad V(x < -L/2) = V(-L/2)$$

angenommen. Physikalisch stellt dieser Bereich die Reservoirs dar, sodass diese Annahme aus der Modellierung des Systems resultiert. Ableitungen transformieren sich gemäß

$$\begin{aligned} \partial_s \partial_q &= \partial_s \left( \frac{\partial}{\partial r_a} \frac{\partial r_a}{\partial q} + \frac{\partial}{\partial r_b} \frac{\partial r_b}{\partial q} \right) \\ &= \left( \frac{\partial}{\partial r_a} \frac{\partial r_a}{\partial s} + \frac{\partial}{\partial r_b} \frac{\partial r_b}{\partial s} \right) \left( \frac{\partial}{\partial r_a} \frac{1}{2} + \frac{\partial}{\partial r_b} \frac{-1}{2} \right) \\ &= \frac{1}{2} (\partial_{r_a}^2 - \partial_{r_b}^2), \end{aligned}$$

wobei im letzten Schritt der Satz von Schwarz genutzt wird. Damit ergibt sich der

transformierte Liouville Operator zu

$$\mathcal{L}(s, q, t) = -\frac{\hbar^2}{m} \partial_s \partial_q + \underbrace{V\left(s + \frac{q}{2}, t\right) - V\left(s - \frac{q}{2}, t\right)}_{\equiv \tilde{B}(s, q, t)} . \quad (2.16)$$

Hier ist nun offensichtlich, dass die Symmetrie  $\mathcal{L}(s, q, t) = -\mathcal{L}(s, -q, t)$  zugrunde liegt. Der Liouvilleoperator ist also antisymmetrisch bezüglich der Relativkoordinate. Mit der Umbenennung

$$\begin{aligned} \rho_{(1)}\left(s + \frac{q}{2}, s - \frac{q}{2}, t\right) &\longrightarrow \tilde{u}(s, q, t) \\ \{s, q, t\} &\longrightarrow \{\tilde{x}, \tilde{y}, \tilde{t}\} \end{aligned} \quad (2.17)$$

lautet die LNG nun

$$i\hbar \partial_{\tilde{t}} \tilde{u}(\tilde{x}, \tilde{y}, \tilde{t}) + \frac{\hbar^2}{m} \partial_{\tilde{x}} \partial_{\tilde{y}} \tilde{u}(\tilde{x}, \tilde{y}, \tilde{t}) - \tilde{B}(\tilde{x}, \tilde{y}, \tilde{t}) \tilde{u}(\tilde{x}, \tilde{y}, \tilde{t}) = 0 .$$

In dieser Form lässt sich die Definition der Stromdichte (Gleichung (2.8)) motivieren. Für  $\tilde{y} = 0$  ist der Driftterm  $\tilde{B}(\tilde{x}, 0, \tilde{t})$  gleich Null. Dann verbleibt mit der Definition der Teilchendichte aus Gleichung (2.7) die *Kontinuitätsgleichung*

$$\partial_{\tilde{t}} n(x, t) = -i \frac{\hbar}{m} \partial_{\tilde{x}} \left( \partial_{\tilde{y}} \tilde{u}(\tilde{x}, \tilde{y}, \tilde{t}) \Big|_{\tilde{y}=0} \right) . \quad (2.18)$$

Da  $n(x, t)$  reell sein muss, muss die rechte Seite ebenfalls reell und deshalb der geklammerte Term rein imaginär sein. Mit der üblichen Kontinuitätsgleichung  $\partial_t n = \partial_x j / e$  folgt hieraus genau die Definition (2.8).

In einem abschließenden, die numerische Behandlung vorbereitenden Schritt wird die LNG in eine einheitenlose Form gebracht, indem sie zunächst durch ein willkürliches  $V_0$  geteilt wird. Energien werden dann in Einheiten von  $V_0$  gemessen, und es bietet sich an, die charakteristische Größe  $V_0 = 0,2098 \text{ eV}$  – die Größe des Potentialsprungs zwischen GaAs und  $\text{Al}_{0,27}\text{Ga}_{0,73}\text{As}$  [18] – hierfür zu verwenden. Ferner wird die folgende Skalierung eingeführt, um Zeiten und Orte ebenfalls einheitenlos zu behandeln:

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} \tilde{x} \\ \tilde{y} \end{pmatrix} &= \xi \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} & \xi &= \sqrt{\frac{\hbar^2}{m V_0}} \\ \tilde{t} &= \tau t & \tau &= \frac{\hbar}{V_0} . \end{aligned} \quad (2.19)$$

Damit folgt

$$\partial_{\tilde{t}} = \frac{\partial}{\partial(\tau t)} = \tau^{-1} \partial_t = \frac{V_0}{\hbar} \partial_t$$

$$\partial_{\tilde{x}}^2 = \frac{\partial^2}{(\partial(\xi x))^2} = \xi^{-2} \partial_x^2 = \frac{mV_0}{\hbar^2} \partial_x^2,$$

sodass die LNG die Form

$$i\partial_{\tilde{t}} u(x, y, t) + \partial_x \partial_y u(x, y, t) - B(x, y, t) u(x, y, t) = 0 \quad (2.20)$$

$$\partial_x \partial_y u(x, y) = B_{\infty}(x, y) u(x, y) \quad (\text{stationär}) \quad (2.21)$$

annimmt. Hierbei ist

$$B(x, y, t) \equiv \frac{\tilde{B}(x, y, t)}{V_0} = \frac{V\left(x + \frac{y}{2}, t\right) - V\left(x - \frac{y}{2}, t\right)}{V_0} \quad (2.22)$$

definiert worden.

### 2.4.2 Wigner-Gleichung

Ausgehend von der Einteilchen-Dichtematrix in Schwerpunkt- und Relativkoordinaten (siehe Gleichungen (2.6) und (2.15)) führt eine Fourier-Transformation bezüglich der Relativkoordinate auf die sogenannte *Wigner-Funktion*

$$f_{(1)}(k, s, t) \equiv \int dq e^{ikq} \left\langle s + \frac{q}{2} \left| \hat{\rho}_{(1)}(t) \right| s - \frac{q}{2} \right\rangle \quad (2.23)$$

die von Wigner [19] 1932 eingeführt worden ist. Die inverse Abbildung ist durch

$$\left\langle s + \frac{q}{2} \left| \hat{\rho}_{(1)}(t) \right| s - \frac{q}{2} \right\rangle = \int \frac{dk}{2\pi} e^{-ikq} f_{(1)}(k, s, t) \quad (2.24)$$

gegeben. Im klassischen Limes ( $\hbar \rightarrow 0$ ) geht die Wigner-Funktion in die aus der klassischen Physik bekannte Wahrscheinlichkeitsdichte im Phasenraum über. Die Position eines Teilchens wird dann mit  $r$  aus Gleichung (2.15) und der Impuls mit  $p = \hbar k$  identifiziert.

In dieser anschaulichen Darstellung ergeben sich Erwartungswerte intuitiv durch Gewichtung der Observablen mit der Verteilungsfunktion und anschließender Integration. So lassen sich Teilchendichte und -strom gemäß

$$n(s, t) = \int \frac{dk}{2\pi} f_{(1)}(k, s, t) \quad (2.25)$$

$$j(s, t) = \int \frac{dk}{2\pi} \hbar k f_{(1)}(k, s, t) \quad (2.26)$$



schreiben [12]. Die LNG für die Wigner-Funktion lautet dann [3, 14]

$$\partial_t f_{(1)}(k, s, t) = -\frac{\hbar k}{m} \partial_r f_{(1)}(k, s, t) - \frac{1}{\hbar} \int \frac{dk'}{2\pi} \mathcal{V}(k - k', s, t) f_{(1)}(k', s, t) \quad (2.27)$$

mit dem Integralkern (auch Wignerpotential genannt)

$$\mathcal{V}(k, s, t) = 2 \int_0^\infty dq \sin(k \cdot q) \left( V\left(s + \frac{q}{2}, t\right) - V\left(s - \frac{q}{2}, t\right) \right)$$

und ist als Wigner-Gleichung bekannt. Sie ist das quantenmechanische Analogon zur Boltzmann-Gleichung. Das Integral auf der rechten Seite entspricht dabei einer Faltung zwischen Potentialterm und Wigner-Funktion bezüglich der Impulskoordinate  $k$ .

### 2.4.3 Randbedingungen

Die Dynamik des in der Einleitung skizzierten Systems muss irreversibel in der Zeit sein. Andernfalls sind instabile Lösungen in der Zeit zulässig [3]. Solche instabilen Lösungen lassen sich anhand des Eigenwertspektrums des Liouvilleoperators aus Gleichung (2.13) erkennen. Es lässt sich zeigen, dass für geschlossene, konservative Systeme  $\mathcal{L}$  hermitesch ist als Folge der Hermitizität des Hamiltonoperators  $H$  [3]. Es gilt [3]

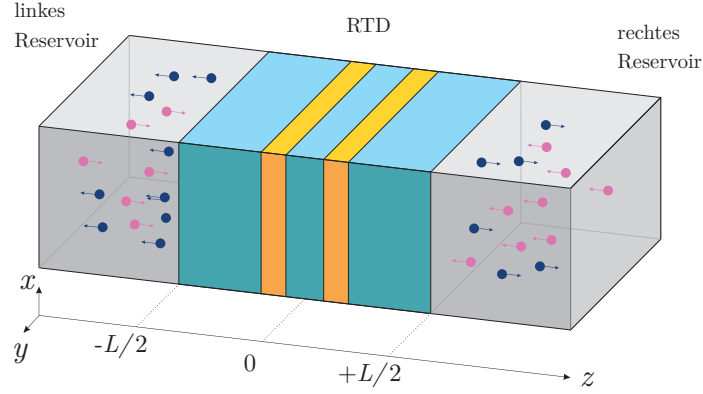
$$H - H^\dagger = \frac{\hbar}{i} \int_{\partial\Omega} \mathbf{j} \, ds = 0.$$

Der Nettostrom durch die Oberfläche  $\partial\Omega$  ist also Null. Damit treten lediglich oszillierende Lösungen der LNG auf. Da jedoch ein offenes System modelliert werden soll (siehe Abschnitt 2.3), muss das Ein- und Austreten von Teilchen in das System erlaubt sein, wodurch die Hermitizität von  $H$  und  $\mathcal{L}$  verletzt wird [3]. Dadurch wird mindestens ein Eigenwert einen nicht-verschwindenden imaginären Teil bekommen. Anhand Gleichung (2.13) ist ersichtlich, dass in der Zeit instabile Lösungen für Eigenwerte mit positivem Realteil auftreten. Falls die Randbedingungen reversibel in der Zeit sind, so sind die Realteile der Eigenwerte symmetrisch und es existieren unphysikalische, instabile Lösungen [3]. Ein Beispiel hierfür ist  $\partial_s \rho = 0$  entlang  $(r_a = \pm L/2, r_b)$  und  $(r_a, r_b = \pm L/2)$ . Diese Randbedingung ist insofern plausibel, da sie zu konstanter Dichte an den Rändern führt und damit den Effekt eines fixierten chemischen Potentials beschreibt. Sie führt jedoch wegen der Zeit-Umkehrbarkeit zu unphysikalisch exponentiell steigenden Lösungen [3].

Die Randbedingungen müssen also irreversibel in der Zeit sein und ferner die Stabilität des Systems sicherstellen. Ein hierfür möglicherweise geeigneter Ansatz

## 2 Physikalische Problemstellung

wird erstmals in [3] getroffen, indem die Reservoirs in Analogie zu einem schwarzen Körper gesehen werden. In das Reservoir eintretende Teilchen werden vollständig absorbiert. Umgekehrt „strahlt“ das Reservoir Teilchen entsprechend der thermischen Gleichgewichts-Verteilung in das System ein, siehe Abbildung 2.3. Damit ist klar,



**Abbildung 2.3** Veranschaulichung des Modells einer in einen elektrischen Schaltkreis integrierten RTD. In den Reservoirs werden Elektronen absorbiert und emittiert. Der in rot angedeutete *Inflow* wird als Randbedingung gesetzt, während der *Outflow* (blau) sich durch die Transportcharakteristik der Bewegungsgleichung ergeben muss.

dass Randbedingungen für Inflow-Teilchen mit positiver Geschwindigkeit am linken Rand und solche mit negativer Geschwindigkeit am rechten Rand der Domäne gesetzt sind, während für Outflow-Teilchen keine Randbedingung vorgegeben ist. Teilchen müssen also nach ihrer Geschwindigkeit unterschieden werden können. Es ist daher ein natürliches Vorgehen, nach einer Wahrscheinlichkeitsverteilung im Phasenraum zu fragen, siehe Kapitel 2.4.2. Positive und negative Geschwindigkeiten lassen sich einfach durch das Vorzeichen von  $k$  unterscheiden, sodass sich die Randbedingungen konkretisieren lassen:

$$\begin{aligned} f_{(1)}(k, -L/2) |_{k>0} &= f_l(k) \\ f_{(1)}(k, +L/2) |_{k<0} &= f_r(k) \end{aligned} \quad (2.28)$$

Die Gleichgewichts-Verteilung der Reservoirs  $f_{l,r}(k)$  folgt aus der Fermi-Dirac-Statistik durch Integration über die zwei freien Richtungen  $k_x$  und  $k_y$ . Die Berechnung findet sich im Anhang A.2 wieder. Es folgt

$$f_{l,r}(k) = \frac{m}{\pi \hbar^2 \beta} \ln \left( 1 + \exp \left( \beta \left( \frac{-k^2 \hbar^2}{2m} + \mu \right) \right) \right). \quad (2.29)$$

und wegen Gleichung (2.24) für die reduzierte Dichtematrix

$$\begin{aligned}\rho_{(1)}(x = \pm L/2, y, t) &= \int \frac{dk}{2\pi} e^{iky} f(k, \pm L/2) \\ &= \int \frac{dk}{2\pi} \cos(ky) f_{r/l}(k) .\end{aligned}\tag{2.30}$$

Das chemische Potential  $\mu$  ergibt sich dabei aus der Forderung nach Ladungsträgerneutralität im thermischen Gleichgewicht. Die Herleitung ist im Anhang A.3 gezeigt. Für die Ausström-Bereiche (auch *Outflow* genannt)  $\{k < 0, x = -L/2\}$  und  $\{k > 0, x = +L/2\}$  trifft (2.28) keine Aussage, sodass jede numerische Methode zwangsläufig ein Upwind-Schema bezüglich der  $r$ -Diskretisierung verwenden muss. Hierin bestätigt sich auch der Charakter der zugrundeliegenden Differentialgleichung (2.27): es wird der Transport von Elektronen beschrieben.

Eine mögliche Wahl der Randbedingungen bezüglich der Relativkoordinate für die LNG sind Dirichlet-Randbedingungen:

$$\rho_{(1)}(x, y = \pm L_y/2, t) = 0\tag{2.31}$$

Numerische Resultate zeigen für diese Wahl jedoch mitunter unphysikalische Interferenzmuster, da es an den Rändern zu Reflexion kommt [4]. Ein Vorschlag ist daher, eine absorbierende Schicht (*complex absorbing potential (CAP)*) der Dicke  $\delta$  einzuführen. Dabei wird der Driftterm  $B(x, y, t)$  aus Gleichung (2.20) um einen komplexen Teil der Größe  $W_0 < 0$  erweitert:

$$\begin{aligned}B(x, y, t) &= \frac{V(x + \frac{y}{2}, t) - V(x - \frac{y}{2}, t)}{V_0} + iW(y) \quad \text{mit} \\ W(y) &= \begin{cases} W_0 \left(y - \frac{L_y}{2} + \delta\right)^2, & \text{falls } \frac{L_y}{2} - \delta \leq y \leq \frac{L_y}{2} \\ W_0 \left(y + \frac{L_y}{2} - \delta\right)^2, & \text{falls } -\frac{L_y}{2} \leq y \leq -\frac{L_y}{2} + \delta \\ 0 & \text{sonst} \end{cases}\end{aligned}\tag{2.32}$$

Die bislang beschriebenen Randbedingungen (Gleichung (2.28) bzw. (2.29)) sind als konventionelle oder auch U-Randbedingungen bekannt [14]. Daneben gibt es weitere Ansätze, wie absorbierende Randbedingungen [20, 21, 4] und Struktur-adaptive Randbedingungen [22]. Der Grund für die Suche nach anderen Randbedingungen liegt zum Einen in der Annahme, dass an den Kontakten keinerlei Rückkopplung der Struktur für die Elektronen zu spüren ist. Im Grenzfall einer unendlich ausgedehnten Struktur ist dies sicherlich gut begründet. Numerische Berechnungen erfordern jedoch stets ein endliches Rechengebiet. Ferner sind physikalische Strukturen immer endlich und durch echte Volumina gekennzeichnet. Korrekte Randbedingungen

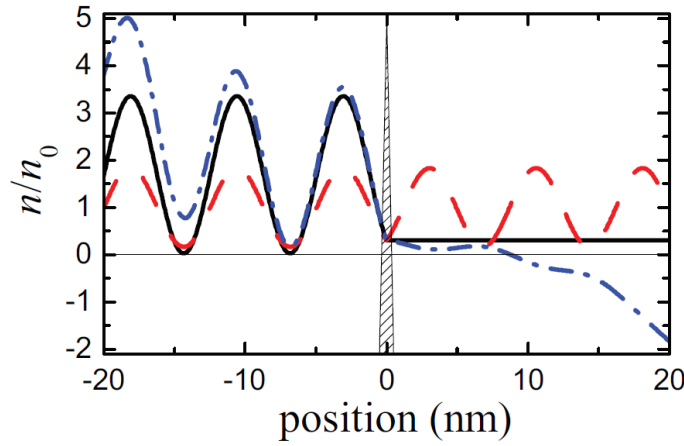
setzen demnach das Wissen über den Zustand des Systems voraus [6]. Krivan et al. [23] haben gezeigt, dass Quanteneffekte über einige thermische Wellenlängen abklingen. In [6] wird für eine typische GaAs Struktur bei 300 K eine Abklinglänge von ca. 100 nm angegeben.

Zweitens ist nicht geklärt, wie Randbedingungen bezüglich der Relativkoordinate in der Ortsraumformulierung zu setzen sind. Die meisten Arbeiten beschäftigen sich mit der Wigner-Gleichung (2.27). Im Gegensatz zur LNG taucht keine zweite Ableitung auf, sodass bezüglich der  $k$ -Richtung keine Randbedingungen benötigt werden [3]. Es ist also insbesondere die Thematik der Randbedingungen, worin sich die beiden Formalismen unterscheiden, wodurch also die Äquivalenz von Wigner- und Schrödingerformalismus aufgehoben wird [24].

Die Arbeit von Rosati et al. [14] weist darauf hin, dass die von Frenley eingeführten Inflow-Randbedingungen zwar semiklassisch zulässig sind, jedoch ihre Verwendung für quantenmechanische Probleme im Allgemeinen nicht gerechtfertigt ist. Dies lässt sich auf die Tatsache zurückführen, dass die semiklassische Boltzmann-Gleichung lokal in  $k$  ist, während das quantenmechanische Pendant – die Wigner-Gleichung – nicht-lokal in  $k$  ist, denn durch die Faltung in Gleichung (2.27) entsteht eine Kopplung zwischen  $k$  und allen anderen  $k$ -Punkten. Die Autoren des Artikels gehen unter Bezug auf den Wigner-Formalismus zwei grundlegenden Fragen nach.

- (i) Ist die Lösung der Differentialgleichung mit den gegebenen Randbedingungen physikalisch akzeptabel? Für die Dichtematrix bedeutet dies insbesondere, dass sie zu positiver Ladungsträgerdichte führen muss.
- (ii) Ist die Lösung eindeutig?

Während die semiklassische Boltzmann-Gleichung aufgrund ihres lokalen Charakters eine eindeutige Lösung besitzt, ist dies für die Wigner-Gleichung nicht der Fall. Abbildung 2.4 zeigt exemplarisch verschiedene stationäre Lösungen für den analytisch lösbaren Fall eines  $\delta$ -Potentials. Die Lösungen ergeben sich dabei aus einer Linearkombination von generischen Vorwärts- und Rückwärts-Streuzuständen, resultierend aus der Zeitumkehr-Symmetrie der stationären Gleichung. Letztere äußert sich auch in der energetischen Zweifach-Entartung der Streuzustände. Eine kurze Rechnung zeigt nämlich, dass wegen der Antisymmetrie des Wignerpotentials sowie der Gruppengeschwindigkeit  $v(k) = \hbar k/m$  bezüglich  $k$  für jede Lösung  $f_{(1)}(k, r)$  auch  $g_{(1)}(k, r) = f_{(1)}(-k, r)$  Lösung der stationären Wigner-Gleichung ist. Die Randbedingungen geben zwar eine eindeutige Überlagerung, also einen eindeutigen Satz von Koeffizienten  $\{a(k)\}$  aller Vorwärts-Streuzustände vor. Da jedoch die Rückwärts-Streuzustände im Allgemeinen linear unabhängig von den Vorwärts-Streuzuständen sind, ist mit denselben Randbedingungen ein doppelt so großer Satz  $\{a(k), b(k)\}$  von Koeffizienten zu finden. Das zuvor eindeutige Problem



**Abbildung 2.4** Nicht-Eindeutigkeit der Wigner-Gleichung für den Fall eines  $\delta$ -Potentials, [14].

ist in diesem Fall nicht mehr eindeutig lösbar. In der Abbildung sind drei verschiedene Verhältnisse  $c = b(k)/a(k)$  zu sehen, darunter auch eine unphysikalische Lösung mit negativer Teilchendichte. Für ausschließlich lokalisierte Zustände, wie sie bei parabolischen oder Quantentopf-Potentialen (mit unendlich großen Barrieren) entstehen, lässt sich jedoch nicht zwischen Vorwärts- und Rückwärts-Streuzuständen unterscheiden sodass eine eindeutige Lösung der Wigner-Gleichung zu erwarten ist [14].

Es ist anzumerken, dass dieselbe Argumentation im allgemeinen Fall der transienten Wigner-Gleichung nicht funktioniert. Dieses Anfangsproblem ist hingegen eindeutig lösbar, wie die Ausarbeitung in [25] zeigt. Es ist daher zu schlussfolgern, dass die Vorgabe einer Anfangsbedingung zu einer spezifischen Lösung aus der unendlichen Menge möglicher stationärer Lösungen führt, und somit die Anfangsbedingung das entscheidende Kriterium für eine physikalisch akzeptable Problemstellung darstellt. Die Wigner-Gleichung erhält in Bezug auf den Anfangszustand darüber hinaus sogar die Eigenschaft (i) [25].

Die vorangegangenen Gedanken lassen sich auf die LNG übertragen. Insbesondere die Inversionssymmetrie der stationären Lösung soll im Folgenden gezeigt werden. Es sei  $u(x, y)$  Lösung der stationären LNG (2.21). Dann ist wegen  $B(x, y) = -B(x, -y)$

auch  $v(x, y) \equiv u(x, -y)$  Lösung, denn

$$\begin{aligned}
 & -\partial_x \partial_\xi u(x, \xi) = -B_\infty(x, \xi) u(x, \xi) \\
 \Leftrightarrow & \quad \partial_x \partial_y u(x, -y) = -B_\infty(x, -y) u(x, -y) \\
 & \quad \quad \quad = B_\infty(x, y) u(x, -y) \\
 \Leftrightarrow & \quad \partial_x \partial_y v(x, y) = B_\infty(x, y) v(x, y) .
 \end{aligned}$$

Abschließend ist zu sagen, dass die gesamte Thematik der Randbedingungen Gegenstand aktueller Forschung ist [26] und die hier gezeigten Aspekte nur einen kleinen Bruchteil der Komplexität darstellen. So verkompliziert sich die gesamte Fragestellung beispielsweise dramatisch, wenn die Mean-Field-Näherung fallengelassen wird und auch nicht-kohärente Effekte berücksichtigt werden. Eine gute Übersicht bieten die Arbeiten von Rossi [27] und Frensey [2]. Für die konkrete numerische Implementierung wird auf die vergleichsweise simplen Resultate (2.28), (2.31) sowie Gleichung (2.32) zurückgegriffen.

## 2.5 Weitere Verfahren

Neben dem hier verwendeten Dichtematrix- bzw. Wigner-Formalismus gibt es einige weitere Möglichkeiten, die stationäre Lösung sowie die Zeitentwicklung für verschiedene Fälle (Gleichgewicht, Nahe-Gleichgewicht und Fern-vom-Gleichgewicht) zu berechnen. Der Artikel [13] bietet einen guten Überblick über die wichtigsten Verfahren. Eine vollständige Theorie gelingt demnach lediglich mit dem *nonequilibrium Green's function (NEGF) approach*, welcher auf den Keldysh-Formalismus zurückzuführen ist. Die Grundidee dabei ist eine diagrammatische Störungstheorie, welche sowohl Vorwärts- als auch Rückwärts-Konturen mit Hilfe von vier Greens-Funktionen berücksichtigt. Die konkrete, vollständige Berechnung mit Hilfe der NEGF gestaltet sich anscheinend schwierig. Die Veröffentlichungen konzentrieren sich zumeist auf Hybridverfahren (z.B. [28, 29]) oder Spezialfälle wie dem stationären Fall [30]. An dieser Stelle soll lediglich festgehalten werden, dass in einer hierarchischen Betrachtungsweise der Dichtematrix-Formalismus weniger Information enthält, denn die Dichtematrix folgt aus einer Integration

$$\rho(x, y, t) = \int \frac{dE}{2\pi} G^<(x, y; E, t) .$$

Deshalb ist die LNG lediglich dazu in der Lage, ein Markov-Verhalten zu beschreiben, wo also externe Wechselwirkung ausschließlich instantan in der Zeit erfolgt [13]. Als Beispiel für das Versagen des Dichtematrix-Formalismus wird die resonante Absorption oder Emission eines Phonons genannt, für die die Schwingungsperiode

des Phonons die Mindestdauer der Wechselwirkung vorgibt. Ein Verfahren, dessen Verteilungsfunktion nicht von allen drei Variablen – Ort, Impuls und Geschwindigkeit – abhängt, wird für die entsprechend fehlende Variable eine Erhaltungsgleichung nicht berücksichtigen [13]. Im Falle der LNG ist dies die Energieerhaltung, was jedoch mit der Modellierung des Systems vereinbar und sogar notwendig ist, siehe Kapitel 2.3. Es gibt Ansätze, diesem Umstand mit Hilfe eines „Gedächtnis-Terms“ beizukommen [31, 28].

Ein Verfahren, welches den Spezialfall des stationären Problems im Gleichgewichtsfall beschreiben kann, wird im folgenden Kapitel 2.5.1 erläutert werden, denn es dient für die numerischen Tests in Kapitel 4.4 als Referenz. Eine numerische Beschreibung, welche nicht analytisch, sondern mit der Finiten Elemente Methode die Schrödingergleichung löst und dabei die Offenheit des Systems berücksichtigt, wurde von Lent und Kirkner [32] erarbeitet und ist als Quantum-Transmitting-Boundary-Methode (QTBM) bekannt.

### 2.5.1 Transfermatrix Methode

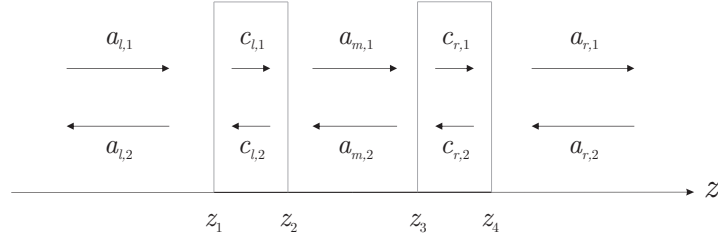
Die Berechnung von reinen Zuständen ist unter Annahme der Stetigkeit von  $\Psi(x)$  und  $\Psi'(x)$  für den Gleichgewichtsfall anhand Gleichung (2.9) analytisch möglich. Dazu wird als Lösung eine Linearkombination von rechts- und linkslaufender ebener Welle angenommen:

$$\Psi_k(z) = \begin{cases} a_{l,1}e^{ikz} + a_{l,2}e^{-ikz} & z \in [-L/2, z_1] \\ c_{l,1}e^{i\kappa z} + c_{l,2}e^{-i\kappa z} & z \in [z_1, z_2] \\ a_{m,1}e^{ikz} + a_{m,2}e^{-ikz} & z \in [z_2, z_3] \\ c_{r,1}e^{i\kappa z} + c_{r,2}e^{-i\kappa z} & z \in [z_3, z_4] \\ a_{l,1}e^{ikz} + a_{l,2}e^{-ikz} & z \in [z_4, +L/2] \end{cases}$$

Hierbei ist  $k = \sqrt{2mE/\hbar^2}$  und  $\kappa = \sqrt{2m(V_0 - E)/\hbar^2}$ . Für das konkrete Problem einer RTD zeigt Abbildung 2.5 die Zuordnung der Koeffizienten und Koordinaten. Mit Hilfe der erwähnten Stetigkeitsbedingung lassen sich acht der zehn Koeffizienten eliminieren, sodass sich mit  $\mathbf{a} \equiv (a_1, a_2)^T$  letztlich

$$\mathbf{a}_r = \underline{\underline{S}}\mathbf{a}_l$$

schreiben lässt. Dabei hängt die Transfermatrix  $\underline{\underline{S}}$  von der Energie  $E(k)$  ab und ihre Existenz ist für  $k \neq 0$  sichergestellt. Der Fall  $k = 0$  stellt gebundene Zustände dar, welche mit dieser Methode nicht erfasst werden können. Die verbliebenen zwei Freiheitsgrade repräsentieren die Notwendigkeit der Randbedingungen. Nun ist es



**Abbildung 2.5** Koeffizienten für hin- und rücklaufende Wellen mit angedeutetem Potentialverlauf der RTD.

wichtig, die Anforderungen aus Kapitel 2.3 korrekt zu berücksichtigen. Eingespeiste Elektronen kommen entweder von links, oder von rechts. Sie werden dabei vollständig decorreliert angesehen, daher muss  $a_{r,2} = 1 - a_{l,1}$  und  $a_{l,1} \in \{0, 1\}$  gelten.

Um nun aus der Energie-abhängigen Wellenfunktion die Dichtematrix zu errechnen, wird Gleichung (2.3) verwendet:

$$\rho(x, y) = \sum_k \omega_k \underbrace{\langle x|k \rangle \langle k|y \rangle}_{\equiv \Psi_k(x)}$$

Der Übergang vom Ein- zum  $N$ -Teilchen System gelingt, indem nun die Normierung  $\sum_k \omega_k = 1$  fallen gelassen und

$$\sum_k \omega_k \Psi_k(x) \Psi_k^\dagger(y) \rightarrow \int dk \frac{m}{\pi \hbar^2 \beta} \ln \left( 1 + \exp \left( \beta \left( \frac{-k^2 \hbar^2}{2m} + \mu \right) \right) \right) \Psi_k(x) \Psi_k^\dagger(y)$$

angesetzt wird, vergleiche hierzu auch die Überlegung im Anhang A.2 und in Kapitel 7 des Buches von Datta [33]. Dazu wird die Wellenfunktion gemäß den obigen Überlegungen als gleichgewichtete Summe von linksseitig ( $a_{l,1} = 1$ ) und rechtsseitig ( $a_{r,2} = 1$ ) eingespeistem Elektron zu

$$\Psi_k(x) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left( \Psi_k^r(x) + \Psi_k^l(x) \right)$$

gewählt. Das vorgestellte Verfahren ist als Transfermatrix-Methode (TM) bekannt.



## 3 Diskretisierung

Eine zeitabhängige partielle Differentialgleichung (PDG)  $n$ -ter Ordnung für skalares  $u(x, t)$  ist von der Form

$$F(x, t, u(x), Du(x), \dots, D^n u(x)) = 0, \quad x \in \Omega \subset \mathbb{R}^d.$$

Sie unterliegt Randbedingungen (für die Zeitvariable auch Anfangsbedingung genannt), die je nach Problemstellung auf Teilen des Randes formuliert sind. Beispielsweise ist die Auslenkung einer eingespannten Membran am Ortsrand fest, während in der Zeit lediglich für  $t_0$  ein Randwert vorliegt.

Die LNG (2.20) ist eine lineare PDG zweiter Ordnung in  $d = 2$  Dimensionen. Sie ist weder elliptisch, noch parabolisch, noch hyperbolisch<sup>1</sup>. Ferner bildet  $u \in C^2(\Omega)$  in den Raum der komplexen Zahlen ab. Damit unterscheidet sich das Problem bereits grundlegend von den zumeist in der Literatur vorkommenden Problemstellungen. Die stationäre LNG hingegen ist hyperbolisch. In diesem Kapitel soll ein Verfahren entwickelt werden, welches bislang noch nicht zur Anwendung gekommen ist im Kontext der LNG: das DG-Verfahren. Die Ausführungen orientieren sich an dem praxisnahen Buch von Hesthaven und Warburton [34].

Zunächst wird ein Überblick über verschiedene, gängige numerische Verfahren gegeben. Vor- und Nachteile werden skizziert, wenngleich die Numerik partieller Differentialgleichungen ein großes Forschungsgebiet ist und somit die verschiedenen angedeuteten Probleme sich möglicherweise nur in einer oberflächlichen Betrachtung als solche äußern. Es folgt der Hauptteil dieser Arbeit, in dem die Entwicklung und theoretische Analyse eines DG-Verfahrens für die LNG detailliert beschrieben wird.

### 3.1 Übersicht

Bei der Diskretisierung einer PDG sind zwei grundlegende Fragestellungen zu berücksichtigen:

1. Auf welche Weise wird die Lösung  $u(x, t)$  durch eine diskrete Lösung  $u_h(x, t)$  genähert? Was sind beispielsweise die Basisfunktionen von  $u_h(x, t)$ ?

---

<sup>1</sup>Dies ist ersichtlich anhand der Eigenwerte der Koeffizientenmatrix zweiter Ableitungen  $T = \text{diag}(0, 1, -1)$  für Gleichung (2.13). Bei elliptischen Problemen haben alle Koeffizienten gleiches Vorzeichen und sind ungleich Null. Bei hyperbolischen Problemen hat genau ein Eigenwert ein anderes Vorzeichen und alle Koeffizienten sind ungleich Null. Parabolische Probleme schließlich sind gekennzeichnet durch genau einen Null-Eigenwert und ansonsten gleiches Vorzeichen.

2. Wie ist die Verbindung zwischen diskretisierter Lösung und zugrundeliegender PDG? In welcher Weise löst also die diskrete Lösung das exakte Problem?

Als Folge einer unterschiedlichen Beantwortung dieser Fragen wurden zahlreiche Verfahren entwickelt, die jeweils spezifische Vor- und Nachteile aufweisen. Im Folgenden werden in knapper Form drei Verfahren vorgestellt und gegeneinander verglichen. In dieser Reihenfolge nimmt die Komplexität zu, denn die Schwächen des einen Verfahrens führen jeweils zu der nächst allgemeineren Formulierung.

#### 3.1.1 Finite Differenzen

Die partiellen Ableitungen werden bei diesem Verfahren durch eine endliche (finite) Anzahl von Differenzen (Finite-Differenzen (FD)) genähert. Zur Formulierung der  $n$ -ten Ableitung einer Funktion  $u(x)$  im Punkt  $x_0$  wird die zugehörige Taylorreihe bis zur  $n$ -ten Ordnung verwendet. Der Punkt  $x_0$  entstammt einem Gitter  $\{x^k\}$ , welches das Gebiet  $\Omega$  diskretisiert. Dieser Ansatz setzt inhärent voraus, dass eine Funktion sich hinreichend genau durch ein lokales Polynom niedriger Ordnung nähern lässt. Damit ist zeitgleich Frage (1) beantwortet.

Die Antwort auf die zweite Frage bestimmt dann die Koeffizienten der lokalen Polynome. Durch Einsetzen der Näherung  $u_h(x, t)$  in die PDG folgt ein Residuum

$$\mathcal{R}(x, t) \equiv F(x, t, u_h(x, t), Du_h(x, t), \dots, D^n u_h(x, t)) ,$$

welches i.A. nicht verschwindet, denn sonst wäre  $u_h(x, t) = u(x, t)$  die exakte Lösung. Zur Bestimmung der Koeffizienten (Freiheitsgrade) wird daher beispielsweise gefordert, dass auf den Gitterpunkten  $\mathcal{R}(x^k, t) = 0 \forall t$  verschwindet.

Das Verfahren ist besonders leicht zu implementieren. Es ist robust, effizient und wird von einer umfangreichen Literatur gestützt. Für zeitabhängige Probleme folgt aus der Ortsdiskretisierung eine explizite semidiskrete Form, was eine Flexibilität in der Wahl der Zeitschritt-Methode ermöglicht. In höherdimensionalen Problemen  $d > 1$  erfordert das Verfahren jedoch eine Tensorprodukt-Struktur der Basisfunktionen, sodass letztlich komplexe Geometrien  $\Omega \subset \mathbb{R}^d$  nicht gut abgebildet werden können. Ferner führen Unstetigkeiten in den Randbedingungen oder internen Schichten (wie zum Beispiel der Potentialsprung in Abbildung 2.2) zu Problemen aufgrund der simplen, zugrundeliegenden Diskretisierung.

#### 3.1.2 Finite Volumen

Für erhöhte geometrische Flexibilität und insbesondere für nichtlineare Erhaltungsgleichungen eignet sich das Finite-Volumen (FV)-Verfahren. Das Gebiet  $\Omega$  wird

dabei in Zellen aufgeteilt, zumeist Simplizes. Die approximative Lösung  $u_h(x, t)$  wird innerhalb einer Zelle  $D^k$  als (zeitabhängige) Konstante  $\bar{u}^k(t)$  gesetzt. Die PDG wird lokal über jede Zelle integriert, wobei auftretende Divergenzterme mit Hilfe des Gaußschen Satzes in Oberflächenterme überführt werden. Für diese Terme müssen geeignete Flüsse gefunden werden und diese Wahl führt zu unterschiedlichen Verfahren. Da der Fluss in eine Zelle hinein demjenigen aus den Nachbarzellen heraus entspricht, sind die FV-Verfahren konservativ.

Während wegen der Flexibilität bezüglich Geometrie und Wahl des Flusses die FV-Verfahren sehr erfolgreich sind, offenbart die Forderung nach Verbesserung der Genauigkeit ein fundamentales Problem: im Mehrdimensionalen müsste die geometrische Flexibilität wieder fallengelassen werden. Um nämlich  $u_h(x, t)$  als Polynom vom Grad  $N$  zu entwickeln und somit  $N + 1$  Koeffizienten zu finden, müssen zellübergreifende Informationen gesammelt werden aus mindestens  $N + 1$  Zellen (der sogenannten *stencil* wird ausgeweitet). Dadurch wird eine spezielle Gitterstruktur erforderlich, weshalb geometrische Flexibilität nicht länger gewährleistet ist[34].

Im eindimensionalen Fall  $d = 1$  ist eine Erhöhung der Genauigkeit jedoch möglich und es soll an dieser Stelle betont werden, dass die LNG ebenso mit einem zweistufigen FV-Verfahren und Polynomgraden  $N_x, N_y > 1$  gelöst werden kann. Die Flexibilität des Gitters ist im Falle eines hybriden FV/DG-Verfahrens ohnehin nicht gegeben (vgl. Kapitel 3.3).

### 3.1.3 Finite Elemente

Der Übergang zu den FEM geschieht, indem die approximative Lösung innerhalb einer Zelle nicht mehr als konstant gesetzt wird. Zur Herleitung eines numerischen Schemas wird bei den FEM die PDG mit einer Testfunktion multipliziert und anschließend über  $\Omega$  integriert. Erhöhung der Genauigkeit durch Erhöhung der Freiheitsgrade ist dann ohne weiteres möglich, indem ähnlich wie beim FD Verfahren das Residuum auf den inneren Interpolationspunkten einer jeden Zelle orthogonal zu allen Testfunktionen sein soll. Die numerische Lösung  $u_h(x, t)$  wird also als lokales Polynom auf jeder Zelle angesetzt, wobei sogar der Polynomgrad von Zelle zu Zelle verschieden sein kann (sogenannte *hp-adaptivity*). Die Wahl der Räume für Basis- und Testfunktionen führt zu unterschiedlichen FEM-Verfahren. Werden an die Polynome zellübergreifende Stetigkeitsanforderungen gestellt, so führt dies zu den *Continuous-Galerkin (CG)*-Methoden.

Ein Nachteil ist hier für zeitabhängige Probleme die implizite Form der Massenma-

trix<sup>2</sup>, die eine Invertierung in jedem Zeitschritt erfordert. Ferner führen Schocks und Unstetigkeiten, wie sie in hyperbolischen Erhaltungsgleichungen auftreten können, zu Problemen [35]. In FD- bzw. FV-Verfahren werden solche Umstände durch ein *Upwind-Schema* bzw. einen *Upwind-Fluss* berücksichtigt. Indem die oben genannte Stetigkeitsanforderung fallen gelassen wird, lassen sich die Vorteile von FV und CG-FEM kombinieren durch die *DG-Methoden*. Genau wie bei den FV-Verfahren ist auch für die DG Methoden die Wahl eines geeigneten Flusses das Herzstück.

Die Tabelle 3.1 zeigt schematisch einige Vor- und Nachteile der genannten Verfahren. Zahlreiche Entwicklungen und Erweiterungen überwinden die Nachteile häufig und es gibt daneben eine Reihe weiterer Eigenschaften, die zumeist problemabhängig sind und daher in dieser Übersicht nicht erwähnt werden können.

**Tabelle 3.1** Schematischer Vergleich der verschiedenen Verfahren nach [34]. Ein  $\times$  bedeutet, dass dieser Aspekt nicht ermöglicht werden kann. Aspekte mit  $(\checkmark)$  benötigen einen Mehraufwand, um sie zu ermöglichen. Eine ausführlichere Erklärung zu den einzelnen Punkten ist in [34] gegeben.

	Komplexe Geometrien	<i>hp</i> -Adaptivität	Explizit semidiskrete Form	Erhaltungsgleichungen	Elliptische Probleme
FD	$\times$	$\checkmark$	$\checkmark$	$\checkmark$	$\checkmark$
FV	$\checkmark$	$\times$	$\checkmark$	$\checkmark$	$(\checkmark)$
CG	$\checkmark$	$\checkmark$	$\times$	$(\checkmark)$	$\checkmark$
DG	$\checkmark$	$\checkmark$	$\checkmark$	$\checkmark$	$(\checkmark)$

## 3.2 Einführung in die Discontinuous-Galerkin-Methoden

Die DG Methoden entstammen als erweiterte FE Methoden den abstrakten Variationsproblemen. Motiviert wird ein solches Problem physikalisch durch die Minimierung einer Energie. Für eine eingespannte Membran führt die Variationsrechnung beispielsweise zu den bekannten Euler-Lagrange Gleichungen. Das abstrakte Problem lautet stets:

$$\text{Finde ein } u \in X, \text{ sodass für alle } v \in X \text{ gilt } a(u, v) = \ell(v). \quad (3.1)$$

Hier ist  $X$  ein Banach-Raum,  $a : X \times X \rightarrow \mathbb{R}$  eine Bilinearform und  $\ell : X \rightarrow \mathbb{R}$  ein lineares Funktional. Der mit Abstand wichtigste Satz in diesem abstrakten Rahmen ist der Satz von Lax-Milgram [36] über die Existenz und Eindeutigkeit (Wohlgestelltheit) einer Lösung. Dazu werden die Begriffe Koerzivität und Beschränktheit benötigt.

<sup>2</sup>Die Massenmatrix wird in Kapitel 3.3.5 analog für DG-Verfahren definiert und ist dort erklärt.

**Definition 3.2.1** (Koerzitivität und Beschränktheit einer Bilinearform). Sei  $X$  ein Hilbertraum,  $a \in \mathcal{L}(X \times X, \mathbb{R})$  und  $b \in \mathcal{L}(X \times X, \mathbb{C})$  Bilinearformen.  $a$  heißt koerzitiv auf  $X$  falls es ein  $\beta > 0$  gibt sodass

$$\forall v \in X : \quad \beta \|v\|_X^2 \leq a(v, v)$$

$b$  heißt koerzitiv auf  $X$  falls es ein  $\beta > 0$  gibt sodass

$$\forall v \in X : \quad \beta \|v\|_X^2 \leq \operatorname{Re}(b(v, v)) \quad (3.2)$$

$a$  und äquivalent  $b$  heißen beschränkt falls es eine Konstante  $C > 0$  gibt sodass

$$\forall v, w \in X : \quad C \|v\|_X \|w\|_X \geq |a(v, w)|.$$

**Satz 3.2.2** (Lax-Milgram). Sei  $X$  ein Hilbertraum,  $a \in \mathcal{L}(X \times X, \mathbb{R})$  und darüber hinaus  $\ell \in \mathcal{L}(X, \mathbb{R}) = X^*$ . Dann ist das Variationsproblem 3.1 wohlgestellt, wenn die Bilinearform beschränkt und koerzitiv ist. Es gilt ferner die a priori Abschätzung

$$\|u\|_X \leq \frac{1}{\beta} \|\ell\|_{X^*}.$$

Für eine PDG ergibt sich die variationale Formulierung (auch als *schwache Formulierung* bezeichnet) mit  $X = W^{k,p}(\Omega)$  aus einer Multiplikation mit einer Testfunktion  $w \in X$  und Integration über die offene beschränkte Menge  $\Omega \subset \mathbb{R}^d$  mit Lipschitz-Rand  $\Gamma = \partial\Omega$ . Dabei ist  $W^{k,p}(\Omega)$  der Sobolev-Raum

$$W^{k,p}(\Omega) \equiv \{\varphi \in L^p(\Omega) : D^\alpha \varphi \in L^p(\Omega) \forall |\alpha| \leq k\} \quad (3.3)$$

mit Norm

$$\|\varphi\|_p = \left\{ \sum_{|\alpha|=k} \|D^\alpha \varphi\|_p^p \right\}^{1/p}.$$

Der Index  $\alpha$  ist im Allgemeinen ein Multiindex und  $D^\alpha \varphi$  ist die sogenannte schwache Ableitung, siehe z.B. [37]. Die *schwache Lösung* ist dann die Lösung dieser schwachen Form. Das Wort *schwach* bezieht sich hierbei auf die schwächere Regularitätsanforderung, denn die Variationsformulierung kontrolliert die Ableitung nur in integraler Form, wie auch die Definition des Sobolev-Raums zeigt.

Im Falle der LNG wird zunächst abstrakt der Rand in Dirichlet-Rand  $\Gamma_D$  mit  $u(x, t)|_{\Gamma_D} = g(x)$  und Rest  $\Gamma \setminus \Gamma_D$  unterteilt. In zwei Dimensionen  $d = 2$  ergibt sich

$$\begin{aligned} i \int_{\Omega} \partial_t u(x, t) v(x, t) + \int_{\Omega} \operatorname{div}(A \nabla u(x, t)) v(x, t) - \int_{\Omega} B(x, t) u(x, t) v(x, t) &= 0 \\ \Rightarrow i \int_{\Omega} \partial_t uv - \int_{\Omega} (A \nabla u) \cdot \nabla v - \int_{\Omega} Buv + \int_{\Gamma \setminus \Gamma_D} n \cdot A \nabla uv &= - \int_{\Gamma_D} n \cdot A \nabla gv. \end{aligned}$$

Prinzipiell wird also alles, was nicht von der Lösung  $u$  selbst abhängt, auf die rechte Seite geschrieben und als lineares Funktional  $\ell(v)$  definiert.

Die FE Methoden verarbeiten das analytische Variationsproblem durch eine geeignete Diskretisierung. Folgende Schritte werden dabei vorgenommen:

- (i) Die abstrakten Sobolev-Räume werden durch endlich-dimensionale Räume  $X_{\mathcal{T}}$  approximiert.
- (ii) Es werden Basisfunktionen für den Raum  $X_{\mathcal{T}}$  definiert.
- (iii) Das Gebiet  $\Omega$  wird in Elemente  $D^1, \dots, D^K$  einfacher Gestalt unterteilt. Hierdurch entsteht im zweidimensionalen die aus vielen Bildern bekannte Dreiecksstruktur komplizierter Oberflächen. Die Teilgebiete lassen sich durch einen Diffeomorphismus  $F_k : \hat{K} \rightarrow D^k$  aus einem Referenzelement  $\hat{K}$  erzeugen. So werden Integrale einmalig auf dem Referenzelement ausgewertet und dann über den Transformationssatz mit  $F_k$  für das jeweilige Element ausgerechnet.

Liegen nun Lösungs- und Testfunktionen in einem abgeschlossenen, nicht-leeren Teilraum  $X_{\mathcal{T}}$  von  $X$ , so folgt erneut Existenz und Eindeutigkeit aus Beschränktheit und Koerzivität der Bilinearform auf  $X$ , wie sich leicht zeigen lässt. Die diskrete Lösung  $u_{\mathcal{T}}$  wird auch als *Ritz-Approximation* bezeichnet, denn die Prozedur geht auf Ritz, Galerkin und Bubnov im Jahre 1915 zurück. Eine Antwort auf die erste Frage des vorangegangenen Abschnittes nach dem Zusammenhang zwischen  $u$  und  $u_{\mathcal{T}}$  gibt das Lemma von Cea. Es trifft eine Abschätzung für  $\|u_{\mathcal{T}} - u\|_X$  und besagt außerdem, dass dieser Fehler umso besser ist, je besser  $X_{\mathcal{T}}$  den Raum  $X$  approximiert.

Die DG-Methoden zählen jedoch zu den *nicht-konformen* Methoden, die sich dadurch unterscheiden dass  $X_{\mathcal{T}} \not\subset X$ . Dann lautet die diskrete Approximation des Variationsproblems

$$\text{Finde ein } u_{\mathcal{T}} \in X_{\mathcal{T}} \text{ , sodass für alle } v_{\mathcal{T}} \in X_{\mathcal{T}} \text{ gilt } a_{\mathcal{T}}(u_{\mathcal{T}}, v_{\mathcal{T}}) = \ell_{\mathcal{T}}(v_{\mathcal{T}}) \quad (3.4)$$

und es gilt das zweite Strang-Lemma als Analogon zum Lemma von Cea.

**Satz 3.2.3** (Zweites Strang-Lemma). *Sei  $u$  Lösung des Variationsproblems 3.1, und  $u_{\mathcal{T}}$  die Ritz-Approximation mit koerzivem  $a \in \mathcal{L}(X_{\mathcal{T}} \times X_{\mathcal{T}}, \mathbb{C})$  und  $\ell_{\mathcal{T}} \in \mathcal{L}(X_{\mathcal{T}}, \mathbb{C})$ . Dann gilt*

$$\begin{aligned} \|u - u_{\mathcal{T}}\|_{X_{\mathcal{T}}} &\leq \left(1 + \frac{C_{\mathcal{T}}}{\beta_{\mathcal{T}}}\right) \inf_{v_{\mathcal{T}} \in X_{\mathcal{T}}} \|u - v_{\mathcal{T}}\|_{X_{\mathcal{T}}} \\ &\quad + \frac{1}{\beta_{\mathcal{T}}} \sup_{w_{\mathcal{T}} \in X_{\mathcal{T}} : \|w_{\mathcal{T}}\|=1} |a_{\mathcal{T}}(u, w_{\mathcal{T}}) - \ell_{\mathcal{T}}(w_{\mathcal{T}})|. \end{aligned}$$

Hierbei sind  $\beta_{\mathcal{T}}$  und  $C_{\mathcal{T}}$  Koerzitivitäts- bzw. Stetigkeitskonstanten des approximierten Variationsproblems 3.4.

Die Existenz und Eindeutigkeit der Ritz-Approximation  $u_{\mathcal{T}}$  ergibt sich wieder aus dem Satz von Lax-Milgram. Alternativ folgt aufgrund der endlichen Dimensionalität des Raumes  $X_{\mathcal{T}}$  in Anbetracht der Linearität des Problems (3.4) die Existenz aus der Eindeutigkeit. Hierzu genügt es, die Koerzivität von  $a_{\mathcal{T}}$  zu zeigen.

Für zeitabhängige Probleme wird in dieser Arbeit wie auch in den meisten Literaturquellen (z.B. in [38]) zunächst im folgenden Abschnitt 3.3 das stationäre Problem als Variationsproblem formuliert und dessen Wohlgestelltheit geprüft. Anschließend wird die Stabilität der Lösung untersucht, also das Vorzeichen der zeitlichen Änderung von  $\|u_{\mathcal{T}}\|$ , siehe Abschnitt 3.3.4.

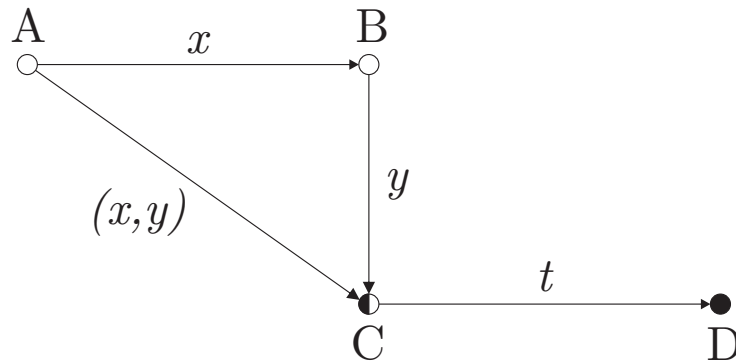
### 3.3 Discontinuous-Galerkin-Verfahren für die Liouville-von-Neumann-Gleichung

Für zeitabhängige PDGn mit Dimensionalität  $d > 1$  gibt es prinzipiell zwei verschiedene Möglichkeiten der Diskretisierung.

- Die jeweiligen Orts-Koordinaten werden sukzessive behandelt – dieses Vorgehen wird als *Methode der Geraden* bezeichnet. Dabei können die einzelnen Richtungen auch mit unterschiedlichen Methoden diskretisiert werden, was im Folgenden als *Hybridverfahren* bezeichnet werden soll. Das resultierende Gitter ist stets ein Rechteckgitter, was wie bereits in Kapitel 3.1.1 erwähnt geometrische Flexibilität nicht zulässt. Andererseits ist dies für rechteckige Gebiete  $\Omega$  unkritisch.
- Die Orts-Koordinaten werden mit einem einzigen Verfahren diskretisiert – die Basisfunktionen ergeben sich dann nicht mehr aus einem Tensorprodukt, sondern sind direkt  $d$ -dimensional.

Die Abbildung 3.1 veranschaulicht das Vorgehen. In Anbetracht der Randbedingungen aus Kapitel 2.4.3 ist das Hybridverfahren ein intuitiverer Zugang, denn die Randbedingungen können nicht einfach als Dirichlet-Randbedingungen auf  $\Gamma$  gesetzt werden. Stattdessen ist eine Unterscheidung hinsichtlich der Geschwindigkeit notwendig, was wiederum eine Diagonalisierung des Ableitungsoperators  $\partial_y$  erfordert. Diese Diagonalisierung lässt sich mit der Methode der Geraden separieren von der  $x$ -Diskretisierung, vergleiche auch die Ausführungen in [4]. Die Diagonalisierung entspricht letztlich einer Fourier-Transformation (FT), denn im Impulsraum ist der Ableitungsoperator diagonal. Eine DG-Diskretisierung bzgl.  $y$  hätte dabei jedoch zur Folge, dass die FT für *double-valued*<sup>3</sup> Punkte ausgewertet werden muss.

<sup>3</sup>An Kanten ist der Funktionswert nicht eindeutig definiert. Es gibt jeweils einen zu Element 1 und einen zu Element 2 zugehörigen Wert, siehe auch Abbildung 3.3.



**Abbildung 3.1** Zwei verschiedene Möglichkeiten, zur semidiskreten Form C zu gelangen. Der Weg über B entspricht dabei der *Methode der Geraden*. Im Punkt C verbleibt ein System gewöhnlicher DGLn, welches mit einem geeigneten Zeitschrittverfahren gelöst wird.

Eine weitere Motivation für das Hybridverfahren ist die Charakteristik der PDG nach erfolgter  $y$ -Diskretisierung. Dann liegt nämlich ein System von Advektions-Reaktions-Gleichungen vor, was wiederum den Transportcharakter der PDG offenbart. DG-Verfahren sind wie bereits in Abschnitt 3.1 angesprochen dank einer flexiblen Wahl des numerischen Flusses für eben solche Transportgleichungen ausgelegt.

In einem vorbereitenden Einschub sollen im Folgenden einige wichtige Erkenntnisse aus der Theorie für Riemann-Probleme hyperbolischer Systeme gezeigt werden. Sie werden später in Abschnitt 3.3.2 benötigt, um einen korrekten numerischen Fluss zu motivieren. In diesem anschließenden Teil wird das DG-Schema für die LNG hergeleitet. Ziel dabei ist die Formulierung eines wohlgestellten Variationsproblems (die Begriffe werden dort erklärt). Dieses wird dann auf Wohlgestelltheit und Stabilität hin untersucht in den Abschnitten 3.3.3 und 3.3.4, bevor die zugehörige Implementierung in Abschnitt 3.3.5 beschrieben wird. Schließlich werden zwei mögliche Realisierungen des Schrittes von Punkt C nach Punkt D aus Abbildung 3.1 vorgestellt.

#### 3.3.1 Riemann-Probleme in hyperbolischen Systemen

Die folgenden Ausführungen orientieren sich an dem Buch von Leveque [39]. Das Riemann-Problem für die skalare Advektionsgleichung  $u_t + f_x(u) = 0$  mit dem Fluss



### 3.3 Discontinuous-Galerkin-Verfahren für die Liouville-von-Neumann-Gleichung

$f(u(x)) = su(x)$  ist durch die diskontinuierliche Anfangswertbedingung

$$u(x, 0) = \begin{cases} u^-, & x < 0 \\ u^+, & x > 0 \end{cases}$$

gestellt. Die *Rankine-Hugoniot-Bedingung* lautet im skalaren Fall

$$s(u^- - u^+) = (f^- - f^+) . \quad (3.5)$$

Die Größe  $s$  ist dabei die Geschwindigkeit, mit der sich die Diskontinuität ausbreitet (*shock speed*). Im allgemeineren Fall eines linearen Systems mit  $f(u) = Au$  wird angenommen, dass die Matrix  $A$  reelle, disjunkte Eigenwerte  $\lambda_1 < \lambda_2 < \dots < \lambda_m$  hat, das heißt  $A$  ist diagonalisierbar gemäß

$$A = R\Lambda R^{-1}$$

mit  $R = [r_1 \ r_2 \ \dots \ r_m]$  als Transformationsmatrix mit den zugehörigen Eigenvektoren. Die Eigenwertgleichung lautet

$$Ar_p = \lambda_p r_p \quad \forall p = 1, \dots, m \quad (3.6)$$

Durch die Zerlegung von  $u^-$  und  $u^+$  in die Eigenwertbasis gemäß

$$u^- = \sum_{p=1}^m \alpha_p r_p \quad u^+ = \sum_{p=1}^m \beta_p r_p,$$

folgt mit  $v = R^{-1}u$  und wegen der Charakteristik der Advektionsgleichung

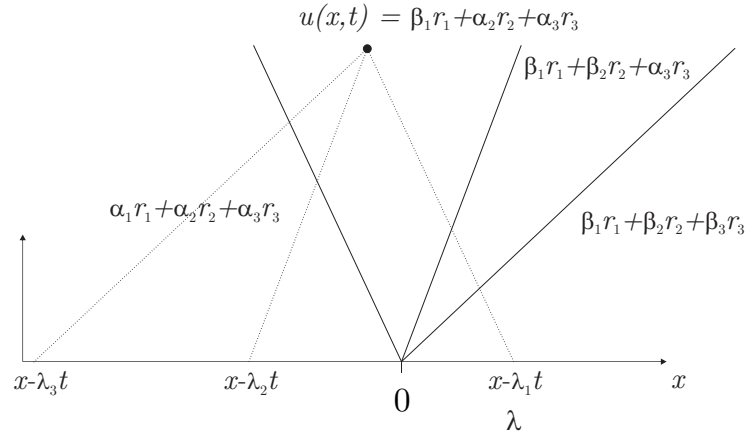
$$v_p(x, t) = \begin{cases} \alpha_p, & x - \lambda_p t < 0 \\ \beta_p, & x - \lambda_p t > 0 \end{cases}$$

Bezeichnet  $J(x, t)$  den größtmöglichen Index  $p$ , für den  $x - \lambda_p t > 0$  gilt, so ist

$$u(x, t) = \sum_{p=1}^{J(x, t)} \beta_p r_p + \sum_{p=J(x, t)+1}^m \alpha_p r_p .$$

Dieser Zusammenhang wird in Abbildung 3.2 gezeigt. Die Lösung ist konstant innerhalb der einzelnen Segmente. Entlang der  $p$ -ten Charakteristik  $x_p = \lambda_p t$  springt die Lösung jedoch. Mit der zu 3.3.1 äquivalenten Definition des Sprungs  $\llbracket u \rrbracket \equiv u^- - u^+$  lässt sich

$$-\llbracket u_p \rrbracket = (\beta_p - \alpha_p) r_p , \quad (3.7)$$



**Abbildung 3.2** Konstruktion der Lösung mit Hilfe der Charakteristiken-Methode am Beispiel dreier Eigenwerte  $\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3$ . In den einzelnen Segmenten ist die Lösung konstant und ergibt sich als Linearkombination der Anfangswerte wie eingezeichnet.

schreiben, wie der Abbildung zu entnehmen ist. Hier ist wieder die Rankine-Hugoniot-Bedingung analog zu Gleichung (3.5) ersichtlich, denn es ist mit  $f(u) = Au$

$$\begin{aligned} \llbracket f \rrbracket_p &= A \llbracket u \rrbracket_p \stackrel{(3.7)}{=} -(\beta_p - \alpha_p) A r_p \stackrel{(3.6)}{=} -(\beta_p - \alpha_p) \lambda_p r_p \\ &= \lambda_p \llbracket u \rrbracket_p . \end{aligned}$$

Um nun den numerischen Fluss  $\hat{f}$  eines DG- oder FV-Verfahrens zu bestimmen, ist  $u$  an dem Ort  $x = 0$  auszuwerten (was in diesen Verfahren den Elementkanten entspricht). Daher können entweder von  $u^-$  ausgehend die Sprünge nach rechts oder von  $u^+$  ausgehend die Sprünge nach links aufaddiert werden. Folglich gilt

$$\begin{aligned} u(x=0) &= u^- + \sum_{\lambda_p < 0} (\beta_p - \alpha_p) r_p = u^+ - \sum_{\lambda_p > 0} (\beta_p - \alpha_p) r_p \quad (3.8) \\ \Rightarrow \quad u(x=0) &= \frac{u^- + u^+}{2} + \frac{1}{2} \left( \sum_{\lambda_p < 0} (\beta_p - \alpha_p) r_p - \sum_{\lambda_p > 0} (\beta_p - \alpha_p) r_p \right) . \end{aligned}$$

Multiplikation mit  $A = R\Lambda R^{-1} = R(\Lambda^+ + \Lambda^-)R^{-1}$  (hierbei enthält  $\Lambda^{+(-)}$  ausschließlich die positiven (negativen) Eigenwerte von  $\Lambda$ ) ergibt den numerischen

Fluss

$$\begin{aligned}
 \hat{f} &= A\{u\} + \frac{1}{2} \left( R \left( \Lambda^+ + \Lambda^- \right) R^{-1} \right) \sum_{\lambda_p < 0} (\beta_p - \alpha_p) r_p \\
 &\quad - \frac{1}{2} \left( R \left( \Lambda^+ + \Lambda^- \right) R^{-1} \right) \sum_{\lambda_p > 0} (\beta_p - \alpha_p) r_p \\
 &= A\{u\} + \frac{1}{2} \left( R \Lambda^- R^{-1} \sum_{\lambda_p < 0} (\beta_p - \alpha_p) r_p - R \Lambda^+ R^{-1} \sum_{\lambda_p > 0} (\beta_p - \alpha_p) r_p \right).
 \end{aligned}$$

Die letzte Gleichheit folgt aus  $\sum_j \left( R^{-1} \right)_{i,j} (r_p)_j = \delta_{i,p} e_p$  (mit  $e_p$  als Einheitsvektor). Im Folgenden soll mit  $|A|$  die Kurzschreibweise für  $(|A|)_{i,j} = |A_{i,j}|$  verwendet werden. Dann lässt sich der Fluss weiter zusammenfassen:

$$\begin{aligned}
 \hat{f} &= A\{u\} + \frac{1}{2} \left( -R |\Lambda^-| R^{-1} \sum_{\lambda_p < 0} (\beta_p - \alpha_p) r_p - R \Lambda^+ R^{-1} \sum_{\lambda_p > 0} (\beta_p - \alpha_p) r_p \right) \\
 &= A\{u\} - \frac{1}{2} \underbrace{\left( R |\Lambda^-| R^{-1} + R \Lambda^+ R^{-1} \right)}_{=R|\Lambda|R \equiv |A|} \sum_p (\beta_p - \alpha_p) r_p \\
 &\stackrel{(3.8)}{=} A\{u\} - \frac{1}{2} |A| \left( u^+ - u^- \right) \\
 &= A\{u\} + \frac{1}{2} |A| \llbracket u \rrbracket.
 \end{aligned}$$

Die gesamte Argumentation funktioniert auch, wenn  $A$  bereits diagonal ist. Am Ausgangspunkt der vektoriellen Advektionsgleichung wird direkt eine Transformation  $u = Rv$  durchgeführt, sodass

$$v_t + \Lambda v_x = 0.$$

Es folgt dann wie oben gezeigt der numerische Fluss

$$\hat{f} = \hat{\Lambda} v = \Lambda \{v\} + \frac{1}{2} |\Lambda| \llbracket v \rrbracket. \quad (3.9)$$

### 3.3.2 Hybridverfahren

In natürlichen Einheiten kann die bezüglich  $y$  diskretisierte LNG (2.20) allgemein durch

$$A^y u_t(x, t) + B^y u_x(x, t) + C^y(x, t) u(x, t) = 0 \quad (3.10)$$

### 3 Diskretisierung

---

geschrieben werden. Die Matrizen  $A^y$ ,  $B^y$  und  $C^y$  resultieren in diesem Abschnitt aus einem FV-Verfahren, können aber ebenso anderen Verfahren entstammen.

Dem FV Ansatz in [4] folgend wird das Intervall  $\Omega_y = [-L_y/2, +L_y/2]$  in  $K_y$  Zellen unterteilt. Dabei ist  $L_y$  die Distanz, über die Quantenkorrelationen berücksichtigt werden, vergleiche auch [3]. Aus der Diskretisierung ergeben sich demnach  $K_y + 1$  Kanten

$$y_{1/2}, y_{3/2}, \dots, y_{K_y+1/2} = -L_y/2, -L_y/2 + \Delta y_1, \dots, +L_y/2.$$

Hierbei ist  $\Delta y_i$  das Volumen der  $i$ -ten Zelle. Der Ansatz führt zu simplen Matrizen der Dimension  $K_y \times K_y$  mit nicht verschwindenden Einträgen gemäß

$$\begin{aligned} A_{i,i}^y &= \Delta y_i \\ B_{i,i+1}^y &= -\frac{i}{2} & B_{i+1,i}^y &= +\frac{i}{2} \\ C_{i,i}^y(x, t) &= i \frac{\Delta y_i}{4} \left( B(x, y_{i+1/2}, t) + B(x, y_{i-1/2}, t) \right) \\ C_{i,i+1}^y(x, t) &= C_{i+1,i}^y(x, t) = i \frac{\Delta y_i}{4} B(x, y_{i+1/2}, t). \end{aligned} \quad (3.11)$$

Hierin ist  $B(x, y, t)$  wie in (2.22) definiert. Dieses Schema impliziert, dass  $u(x, t)$  an den Kanten als Mittelwert von rechts- und linksseitiger Zelle angenommen wird. Des weiteren sind homogene Dirichlet Randbedingungen angenommen, also  $u(x, y_{1/2}, t) = u(x, y_{K_y+1/2}, t) = 0$ .

Die Matrix  $B^y$  kann analytisch diagonalisiert werden. Es ist  $B^y = R \Lambda^y R^\dagger$  mit der Diagonalmatrix

$$\Lambda_{m,n}^y = \cos\left(\frac{2\pi n}{K_y + 1}\right) \delta_{m,n} \quad m, n = 1, \dots, K_y \quad (3.12)$$

und zugehörigen Eigenvektoren

$$R_{m,n} = i^m \sin\left(\frac{mn\pi}{K_y + 1}\right) \quad m, n = 1, \dots, K_y. \quad (3.13)$$

Die Matrix  $R$  ist unitär:  $R^{-1} = R^\dagger$ . Der Einfachheit halber wird nun  $\Delta y_i = h_y$  konstant gesetzt, sodass

$$(A^y)^{-1} B^y = h_y^{-1} R \Lambda^y R^{-1}$$

gilt. Mit der unitären Transformation

$$v(x, t) \equiv R^\dagger u(x, t) \quad (3.14)$$

### 3.3 Discontinuous-Galerkin-Verfahren für die Liouville-von-Neumann-Gleichung

sowie der Definition

$$G(x, t) \equiv h_y^{-1} R^\dagger C^y(x, t) R \quad (3.15)$$

folgt die diagonalisierte PDG

$$v_t(x, t) + f(v(x, t))_x(x, t) + G(x, t) v(x, t) = 0. \quad (3.16)$$

Dies ist ein System von  $K_y$  gekoppelten Advektions-Reaktions-Gleichungen mit Anfangsbedingung

$$v(x, 0) = \left( v(y_1, x, 0), \dots, v(y_{K_y}, x, 0) \right)^T = v_0(x) = R^{-1} u_0(x)$$

und Fluss

$$f(v(x, t)) = \Lambda^y v(x, t). \quad (3.17)$$

Zur Formulierung der Randbedingungen gemäß den Überlegungen in Kapitel 2.4.3 muss zunächst der Einströmrand  $\Gamma^-$  definiert werden. Sei dazu  $\Omega_x = (-L_x/2, L_x/2)$  ein beschränktes, offenes Gebiet mit Lipschitz Rand  $\partial\Omega_x$  in  $\mathbb{R}$ . Es bezeichne  $\Gamma_x \equiv (\partial\Omega_x)^{K_y}$  die Zusammenfassung des Randes der  $K_y$  PDGn. Der Einströmrand kann dann definiert werden gemäß

$$\Gamma^- \equiv \{x \in \Gamma_x : \Lambda \cdot n(x) < 0\},$$

wobei  $n(x)$  der bzgl.  $\Omega_x$  nach außen zeigende Normalenvektor ist. Um nun die Randbedingung aus Gleichung (2.30) einzubringen, müssen diese gemäß Gleichung (3.14) noch transformiert werden. Es folgen die gesuchten Randbedingungen für das System (3.16):

$$v(x, t) = g(x, t) \quad \text{auf } \Gamma^- \text{ mit} \quad (3.18)$$

$$g(x_r/x_l, t) = R^\dagger \left( \int \frac{dk}{2\pi} \cos(ky_1) f_{r/l}(k), \dots, \int \frac{dk}{2\pi} \cos(ky_{K_y}) f_{r/l}(k) \right)^T$$

Das Gebiet  $\Omega_x$  wird durch die Vereinigung von  $K_x$  nicht überlappenden Elementen  $D^k = [x_{k-1/2}, x_{k+1/2}]$  trianguliert und diese Triangulierung sei mit  $\mathcal{T}$  bezeichnet. Gesucht wird eine diskrete Lösung  $v_{\mathcal{T}}$  als Element des Finite-Elemente-Raumes

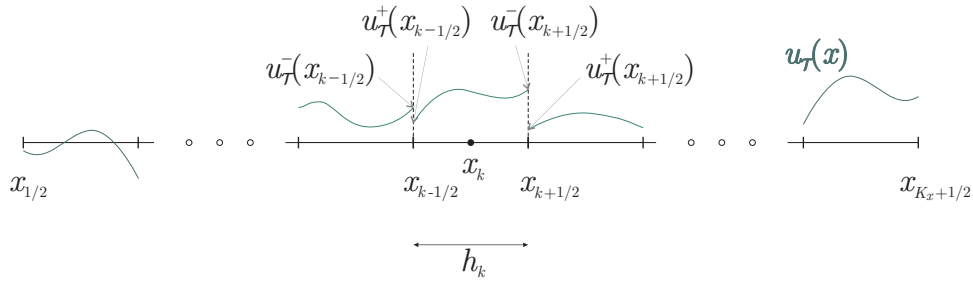
$$X_{\mathcal{T}} = (X_{\mathcal{T},1})^{K_y} \equiv \left( \{v \in L^1(\Omega_x) : v|_{D^k} \in \mathcal{P}_N(D^k) \forall k = 1, \dots, K_x\} \right)^{K_y}, \quad (3.19)$$

wobei  $\mathcal{P}_N$  der  $N+1 = N_p$ -dimensionale Raum der Polynome vom Grad  $N$  ist.  $X_{\mathcal{T},1}$  ist Teilmenge des gebrochenen Sobolev-Raumes

$$H^1(\mathcal{T}) = \{v \in L^2(\Omega_x) : v|_{D^k} \in H^1(D^k) \forall D^k \in \mathcal{T}\},$$

welcher wiederum nicht Teilmenge des Lösungsraumes  $X = H^1(\Omega)$  ist. Dies zeigt die Nicht-Konformität der Methode. Dennoch ist auch  $H^1(\mathcal{T})$  Hilbertraum und es lässt sich der Satz von Lax-Milgram anwenden.

Der finite Elemente Raum (3.19) lässt Unstetigkeiten zu und diese werden gemäß Abbildung 3.3 gekennzeichnet. Werte am linken Rand eines Elementes bekommen den Index „+“ und Werte am rechten Rand den Index „-“.



**Abbildung 3.3** Notation für das eindimensionale DG-Verfahren.

**Definition 3.3.1** (Sprung und Mittelwert). *Es bezeichne  $F = \cup_{D^k \in \mathcal{T}} \partial D^k$  die Menge aller Elementkanten. Auf inneren Kanten  $e \in F_i = F \setminus \partial\Omega_x$  werden*

$$[[u_{\mathcal{T}}]]_e = u_{\mathcal{T}}^-|_e - u_{\mathcal{T}}^+|_e \quad \{u_{\mathcal{T}}\}_e = \frac{1}{2} (u_{\mathcal{T}}^-|_e + u_{\mathcal{T}}^+|_e) \quad (3.20)$$

als Sprung  $[[u_{\mathcal{T}}]]_e$  und Mittelwert  $\{u_{\mathcal{T}}\}_e$  von  $u_{\mathcal{T}} \in X_{\mathcal{T}}$  definiert. Auf den zwei äußeren Kanten  $e \in F_e = F \setminus F_i$  wird diese Definition durch

$$[[u_{\mathcal{T}}]]_e \equiv \begin{cases} -u_{\mathcal{T},l}^+ \equiv -u_{\mathcal{T}}(x_{1/2}) & , \text{ links} \\ u_{\mathcal{T},r}^- \equiv u_{\mathcal{T}}(x_{K_x+1/2}) & , \text{ rechts} \end{cases} \quad \{u_{\mathcal{T}}\}_e = \begin{cases} u_{\mathcal{T},l}^+ & , \text{ links} \\ u_{\mathcal{T},r}^- & , \text{ rechts} \end{cases} \quad (3.21)$$

erweitert. Ganz analog werden Sprung und Mittelwert für  $u \in X_{\mathcal{T},1}$  definiert. Damit gilt für  $u, v \in X_{\mathcal{T}}$  die Relation

$$[[u^\dagger v]] = c \left( [[u]]^\dagger \{v\} + \{u\}^\dagger [[v]] \right) \quad (3.22)$$

mit  $c = 1$  für innere und  $c = 1/2$  für äußere Kanten.

Um nun das DG Schema zu entwickeln, wird die Gleichung (3.16) in die variationale Formulierung (3.4) gebracht. Gesucht sind Bilinearform  $a$  und Linearform  $\ell$ , an die folgende Anforderungen gestellt werden:

### 3.3 Discontinuous-Galerkin-Verfahren für die Liouville-von-Neumann-Gleichung

- *Konsistenz*: Für die schwache Lösung  $u \in H^1(\Omega)$  der LNG und jede Funktion  $v \in L^2(\Omega)$ , die elementweise in  $H^1(D^k)$  ist, gilt  $a_{\mathcal{T}}(u, v) = \ell_{\mathcal{T}}(v)$ .
- Beschränktheit und Koerzivität der Bilinearform nach Definition 3.2.1.

Der zweite Punkt ist diffizil und kann einzig durch eine gute Wahl des numerischen Flusses gewährleistet werden. Konsistenz hingegen wird erreicht, indem zu der analytischen Form (3.16) lediglich Sprungterme hinzugefügt werden, welche für die schwache Lösung  $u \in H^1(\Omega)$  verschwinden. Der Grund hierfür liegt im zweiten Sobolev'schen Einbettungssatz [36]. Demnach bettet  $W^{m,p}(\Omega)$  stetig in  $C^l(\bar{\Omega})$  ein, falls die Sobolev-Zahl  $\text{sob}(W^{m,p}) \geq l$ . Insbesondere ist für  $\Omega \in \mathbb{R}^1$  die Sobolevzahl  $\text{sob}(H^1) = 1 - 1/2$ , weshalb  $H^1$  stetig in  $C^0$  einbettet. Für die schwache Lösung verschwinden also Sprungterme.

Multiplikation der diagonalisierten LNG (3.16) mit einer Testfunktion  $\varphi \in X_{\mathcal{T}}$ , Integration über ein Element  $D^k$  und anschließende partielle Integration liefert

$$\int_{D^k} \left( \varphi^\dagger \partial_t v - (\partial_x \varphi^\dagger) f(v) + \varphi^\dagger Gv \right) + \int_{\partial D^k} \hat{n} \varphi^\dagger f = 0$$

mit dem nach außen zeigenden Normalenvektor  $\hat{n}$ . Das Residuum ist also erneut bezüglich der  $L^2$ -Norm orthogonal zu allen Testfunktionen. Durch Summation über alle  $K_x$  Elemente folgt

$$\sum_{D^k \in \mathcal{T}} \int_{D^k} \left( \varphi^\dagger \partial_t v - (\partial_x \varphi^\dagger) f(v) + \varphi^\dagger Gv \right) + \sum_{e \in F_i} \int_e \llbracket \varphi^\dagger f \rrbracket + \sum_{e \in F_e} \int_e \llbracket \varphi^\dagger f \rrbracket = 0.$$

Nun wird Relation (3.22) und die Stetigkeit der schwachen Lösung  $v$  genutzt ( $\llbracket v \rrbracket = \llbracket f \rrbracket = 0$ ).

$$\sum_{D^k \in \mathcal{T}} \int_{D^k} \left( \varphi^\dagger \partial_t v - (\partial_x \varphi^\dagger) f(v) + \varphi^\dagger Gv \right) + \sum_{e \in F_i} \int_e \llbracket \varphi^\dagger \rrbracket f + \sum_{e \in F_e} \int_e \llbracket \varphi^\dagger \rrbracket f = 0 \quad (3.23)$$

An dieser Stelle wird die schwache Lösung  $v$  durch ihre diskrete Ritz-Approximation  $v_{\mathcal{T}}$  ersetzt. Dabei wird in dieser Arbeit diese Ansatzfunktion gemäß der variationalen Formulierung (3.4) aus demselben Raum wie die Testfunktion gesucht, was dem *Galerkin-Ansatz* entspricht. Das führt dazu, dass der Fluss  $f_{\mathcal{T}} = f(v_{\mathcal{T}})$  nicht mehr eindeutig definiert ist auf den Elementkanten. Er wird durch den *single-valued numerischen Fluss*  $\hat{f}$  ersetzt. Dieser ergibt sich in sinnvoller Weise aus der Lösung des Riemann-Problems aus Abschnitt 3.3.1, denn die Situation im DG-Verfahren entspricht gerade einem solchen Problem. Die Elementkanten entsprechen den Orten der Diskontinuitäten und die Matrix  $\Lambda$  enthält wie gefordert disjunkte Eigenwerte. Aufgabe des numerischen Flusses ist es, die Randbedingungen in einer schwachen

Weise einzubauen. So sollte beispielsweise für positive Geschwindigkeiten  $\lambda_j$  (als Eigenwerte von  $\Lambda$ ) am linken Rand

$$\left( \hat{f}(g, v^+) \right)_j = \lambda_j g(x = -L_x/2)$$

gelten und damit dem Upwind-Charakter der PDG Rechnung getragen werden. Der numerische Fluss

$$\hat{f} = \begin{cases} \Lambda\{v\}_e + \kappa|\Lambda|[[v]]_e & e \in F_i \\ \frac{1}{2}\Lambda(v^- + g) + \kappa|\Lambda|(v^- - g) & e = x_{K_x+1/2} \\ \frac{1}{2}\Lambda(v^+ + g) + \kappa|\Lambda|(g - v^+) & e = x_{1/2} \end{cases} \quad (3.24)$$

aus dem vorherigen Abschnitt entspricht mit  $\kappa = 1/2$  einem *Upwind-Fluss*. Dabei kann der letzte Term als Strafterm angesehen werden, der Sprünge der Lösung „bestraft“. Der Upwind-Fluss ist zwar ein Spezialfall dieser allgemeineren Formulierung, numerische Experimente zeigen jedoch in Konsistenz mit den Ergebnissen in [40], dass lediglich  $\kappa = 1/2$  akzeptable Ergebnisse liefert. Das entspricht der Erwartung, denn der Upwind-Fluss stellt wegen Erfüllung der Rankine-Hugoniot-Bedingung die beste Approximation an  $f$  dar. Es gilt insbesondere für die schwache Lösung  $\hat{f}(u, u) = f(u)$ , wodurch die *Konsistenz* des Verfahrens sichergestellt ist. Der Upwind-Charakter des Flusses wird deutlich, wenn einzelne Eigenwerte  $\lambda$  betrachtet werden. Ist beispielsweise  $\lambda > 0$ , so folgt wie gefordert  $\hat{f} = \lambda v^-$  auf inneren Kanten und am rechten Rand sowie  $\hat{f} = \lambda g$  am linken Rand.

Einsetzen des numerischen Flusses für  $\kappa = 1/2$  in Gleichung (3.23) zusammen mit dem Übergang zur Ritz-Approximation  $v_T$  ergibt die *schwache Formulierung* des Hybridverfahrens:



**Problem 3.3.1** (Schwache variationale Formulierung der LNG). *Finde ein  $v_{\mathcal{T}} \in X_{\mathcal{T}}$ , sodass für alle  $\varphi \in X_{\mathcal{T}}$  gilt  $a_{\mathcal{T}}^w(v_{\mathcal{T}}, \varphi) + b_{\mathcal{T}}(v_{\mathcal{T}}, \varphi) = \ell_{\mathcal{T}}(\varphi)$ . Hierin sind*

$$\begin{aligned} a_{\mathcal{T}}^w(v_{\mathcal{T}}, \varphi) &= \sum_{D^k \in \mathcal{T}} \int_{D^k} \left( -(\partial_x \varphi^\dagger) f(v_{\mathcal{T}}) + \varphi^\dagger G v_{\mathcal{T}} \right) \\ &\quad + \sum_{e \in F_i} \int_e \llbracket \varphi^\dagger \rrbracket \left( \Lambda \{v\} + \frac{1}{2} |\Lambda| \llbracket v \rrbracket \right) \\ &\quad + \int_{e_r} \llbracket \varphi^\dagger \rrbracket \frac{1}{2} (\Lambda + |\Lambda|) \llbracket v_{\mathcal{T}} \rrbracket + \int_{e_l} \llbracket \varphi^\dagger \rrbracket \frac{1}{2} (-\Lambda + |\Lambda|) \llbracket v_{\mathcal{T}} \rrbracket \\ b_{\mathcal{T}}^w(v_{\mathcal{T}}, \varphi) &= \sum_{D^k \in \mathcal{T}} \int_{D^k} \varphi^\dagger \partial_t v_{\mathcal{T}} \\ \ell_{\mathcal{T}}(\varphi) &= - \int_{e_r} \llbracket \varphi^\dagger \rrbracket \frac{1}{2} (\Lambda - |\Lambda|) g - \int_{e_l} \llbracket \varphi^\dagger \rrbracket \frac{1}{2} (\Lambda + |\Lambda|) g \end{aligned}$$

mit der Diagonalmatrix  $\Lambda$  aus Gleichung (3.12), dem Driftterm  $G$  aus Gleichung (3.15) sowie dem Fluss  $f(v) = \Lambda v$ .

Integrale über Kanten dienen hier lediglich der Übersicht. Da sie aber im Eindimensionalen Auswertungen an einem Punkt entsprechen, sind sie letztlich redundant. Eine weitere partielle Integration des Flussterms führt auf die *starke Formulierung*, die höhere Regularität an  $u_{\mathcal{T}}$  fordert. Der dabei auftretende Term  $\llbracket \varphi^\dagger f(v_{\mathcal{T}}) \rrbracket$  lässt sich mit Hilfe der Relation (3.22) umformen.

**Problem 3.3.2** (Starke variationale Formulierung der LNG). *Finde ein  $v_{\mathcal{T}} \in X_{\mathcal{T}}$ , sodass für alle  $\varphi \in X_{\mathcal{T}}$  gilt  $a_{\mathcal{T}}^s(v_{\mathcal{T}}, \varphi) + b_{\mathcal{T}}(v_{\mathcal{T}}, \varphi) = \ell_{\mathcal{T}}(\varphi)$ . Hierin sind*

$$\begin{aligned} a_{\mathcal{T}}^s(v_{\mathcal{T}}, \varphi) &= \sum_{D^k \in \mathcal{T}} \int_{D^k} \left( \varphi^\dagger \partial_x f(v_{\mathcal{T}}) + \varphi^\dagger G v_{\mathcal{T}} \right) \\ &\quad + \sum_{e \in F_i} \int_e \left( \llbracket \varphi^\dagger \rrbracket \frac{1}{2} |\Lambda| - \{\varphi^\dagger\} \Lambda \right) \llbracket v_{\mathcal{T}} \rrbracket \\ &\quad + \int_{e_r} \llbracket \varphi^\dagger \rrbracket \frac{1}{2} (-\Lambda + |\Lambda|) \llbracket v_{\mathcal{T}} \rrbracket + \int_{e_l} \llbracket \varphi^\dagger \rrbracket \frac{1}{2} (\Lambda + |\Lambda|) \llbracket v_{\mathcal{T}} \rrbracket \end{aligned} \tag{3.25}$$

und  $b, \ell$  wie in der schwachen Formulierung 3.3.1 definiert.

### 3.3.3 Existenz und Eindeutigkeit

Für die Bilinearform aus Problem 3.3.2 soll im Folgenden die Existenz und Eindeutigkeit der Ritz-Approximation für die stationäre LNG mit  $\partial_t v_{\mathcal{T}} = 0$  untersucht werden.

Dazu ist Koerzitivität nach Definition 3.2.1 erforderlich. Es gilt mit  $v \in X_{\mathcal{T}}$

$$\begin{aligned}
\sum_{D^k \in \mathcal{T}} \int_{D^k} v^\dagger \partial_x f(v) &= \frac{1}{2} \partial_x \sum_{D^k \in \mathcal{T}} \int_{D^k} v^\dagger f(v) \\
&= \sum_{e \in F} \int_e \frac{1}{2} \llbracket v^\dagger f(v) \rrbracket \\
&\stackrel{(3.22)}{=} \sum_{e \in F_i} \int_e \{v^\dagger\} \llbracket f(v) \rrbracket + \sum_{e \in F_e} \int_e \frac{1}{2} \{v^\dagger\} \llbracket f(v) \rrbracket \\
&\stackrel{(3.21)}{=} \sum_{e \in F_i} \int_e \{v^\dagger\} \llbracket f(v) \rrbracket + \int_{e_r} \frac{1}{2} \llbracket v^\dagger \rrbracket \llbracket f(v) \rrbracket - \int_{e_l} \frac{1}{2} \llbracket v^\dagger \rrbracket \llbracket f(v) \rrbracket .
\end{aligned}$$

Dieser Ausdruck hebt sich folgerichtig mit den entsprechenden Termen der Bilinearform (3.25) auf. Es verbleibt

$$a_{\mathcal{T}}^s(v, v) = \sum_{D^k \in \mathcal{T}} \int_{D^k} v^\dagger G v + \sum_{e \in F} \int_e \llbracket v^\dagger \rrbracket \frac{1}{2} |\Lambda| \llbracket v \rrbracket ,$$

anhand dessen Form zu erkennen ist, dass lediglich der durch den numerischen Fluss eingeführte Strafterm sowie der Potentialterm  $G$  stabilisierend wirken. Statt des Faktors  $1/2$  lässt sich erneut in der allgemeineren Formulierung der Faktor  $\kappa$  schreiben. Um den Realteil der Bilinearform zu erhalten, wird dessen komplex Konjugiertes hinzu addiert.

$$2 \operatorname{Re}(a_{\mathcal{T}}^s(v, v)) = \sum_{D^k \in \mathcal{T}} \int_{D^k} v^\dagger (G + G^\dagger) v + \sum_{e \in F} \int_e \llbracket v^\dagger \rrbracket |\Lambda| \llbracket v \rrbracket \quad (3.26)$$

An dieser Stelle ist die Anfälligkeit des Verfahrens ersichtlich. Damit die rechte Seite auf eine Norm von  $v$  zurückgeführt werden kann, müssen zwei Bedingungen erfüllt sein. Erstens muss  $\forall i = 1 \dots K_y$  gelten, dass  $\lambda_i \neq 0$ , genau wie bereits im Transfermatrix-Verfahren (vergleiche Abschnitt 2.5.1). Zweitens muss der Realteil aller Eigenwerte von  $(G + G^\dagger)$  gemäß der Bedingung (3.2) größer 0 sein. Gibt es solche Schranken  $g_0$  und  $\lambda_{\min}$  (als betragsmäßig kleinster Eigenwert von  $\Lambda$ ), so folgt unmittelbar

$$\begin{aligned}
\operatorname{Re}(a_{\mathcal{T}}^s(v, v)) &\geq g_0 |||v||| \quad \text{mit} \\
|||\cdot|||_X &= \sum_{D^k \in \mathcal{T}} \int_{D^k} |\cdot|^2 + \sum_{e \in F} \int_e \frac{\lambda_{\min}}{g_0} |\llbracket \cdot \rrbracket|^2 .
\end{aligned} \quad (3.27)$$

Andernfalls ist die Bilinearform nicht koerzitiv. Dieses Resultat ist konsistent mit den Erkenntnissen in der Literatur [41], wo das skalare Problem

$$\partial_t u + \mathbf{v} \cdot \nabla u - \epsilon \Delta u + cu = g$$

### 3.3 Discontinuous-Galerkin-Verfahren für die Liouville-von-Neumann-Gleichung

mit einem elliptischen Anteil  $\propto \epsilon$  betrachtet wird. Die Koerzivität der Bilinearform beruht für  $\epsilon = 0$  dort auf der Annahme, dass  $c - 1/2 \operatorname{div} \mathbf{v} \geq \gamma_0 > 0 \forall x \in \Omega_x$  gilt. Im Fall der diagonalisierten LNG entspricht die Geschwindigkeit  $\mathbf{v}$  den Eigenwerten  $\Lambda$ , deren Ableitung wegen der expliziten Form (3.12) verschwindet.

Das Eigenwertspektrum von  $G(x) + G^\dagger(x)$  gleicht dem Spektrum von  $C(x) + C^\dagger(x)$  (modulo Faktor  $h_y > 0$ ), da  $C$  und  $G$  über die unitäre Transformation (3.15) miteinander verknüpft sind. Die Matrix  $C$  ist nach Gleichung (3.11) symmetrisch, weshalb  $C + C^\dagger = 2 \operatorname{Re}(C)$  gelten muss. Anhand Gleichung (2.32) ist zu sehen, dass der Realteil von  $C$  einzig aus dem CAP besteht. Offenbar ist  $\operatorname{Re}(C)$  positiv semidefinit, da  $W_0 < 0$  gilt. Die untere Schranke  $g_0$  entspricht also leider gerade 0. Koerzivität nach Definition 3.2.1 und damit einhergehend Existenz der Ritz-Approximation für das Problem 3.3.2 ist somit nicht gewährleistet. Interessant ist, dass dieses Resultat in Einklang mit den in Kapitel 2.4.3 beschriebenen Überlegungen zur Nicht-Eindeutigkeit der stationären Lösung steht.

Es ist anzumerken, dass die Wahl des numerischen Flusses keinerlei Einfluss auf den Volumenteil der Norm in (3.27) hat. Schließlich können bestenfalls Sprungterme ergänzt werden, die jedoch beispielsweise für  $v \in C^0(\Omega)$  verschwinden und somit auch nicht mit einer eventuellen Spurungleichung in den Volumenteil der Norm eingehen können. Dies scheint ein inhärentes Problem zu sein.

Auffällig an der Argumentation ist, dass die Randbedingungen lediglich in Form ihrer Charakteristik zur Definition eines Upwind-Flusses eingehen. Solange die rechte Seite des Variationsproblems  $\ell(\varphi)$  in  $\mathcal{L}(X_{\mathcal{T}}, \mathbb{C})$  liegt, ist die konkrete Form von  $g(x)$  nicht weiter relevant.

#### 3.3.4 Stabilität

Stabile Lösungen zeichnen sich dadurch aus, dass alle Eigenwerte des Liouvilleoperators aus Gleichung (2.16) negativen Imaginärteil haben, wie sich leicht anhand der Form  $i \frac{d}{dt} \rho = \mathcal{L} \rho$  nachvollziehen lässt. Numerisch kann einerseits das Eigenwertspektrum der entsprechenden Matrix untersucht werden. Andererseits kann und soll im Folgenden eine Abschätzung für den Term  $\frac{d}{dt} \|v_{\mathcal{T}}\|_{L^2(\Omega_x)}^2$  gefunden werden. Dazu wird zu der starken Formulierung 3.3.2 ihr komplex konjugiertes hinzu addiert und die Testfunktion  $\varphi = v_{\mathcal{T}}$  verwendet. Mit Hilfe des Resultates (3.26) für den stationären Anteil der Bilinearform sowie den Überlegungen bezüglich des Driftterms

aus dem vorherigen Abschnittes folgt

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \|v_{\mathcal{T}}\|_{L^2(\Omega_x)}^2 &= - \sum_{D^k \in \mathcal{T}} \int_{D^k} v_{\mathcal{T}}^\dagger (G + G^\dagger) v_{\mathcal{T}} - \sum_{e \in F} \int_e \llbracket v^\dagger \rrbracket |\Lambda| \llbracket v_{\mathcal{T}} \rrbracket + 2 \operatorname{Re} (\ell_{\mathcal{T}} (v_{\mathcal{T}})) \\ &\stackrel{g_0=0}{\leq} - \sum_{e \in F} \int_e \lambda_{\min} |\llbracket v_{\mathcal{T}} \rrbracket|^2 + 2 \operatorname{Re} (\ell_{\mathcal{T}} (v_{\mathcal{T}})) . \end{aligned} \quad (3.28)$$

Mit der Annahme  $-\sum_{e \in F} \int_e \lambda_{\min} |\llbracket v_{\mathcal{T}} \rrbracket|^2 \leq 2 \operatorname{Re} (\ell_{\mathcal{T}} (v_{\mathcal{T}}))$  folgt die Stabilität. Diese Behauptung wiederum soll in der vorliegenden Arbeit lediglich *a posteriori* bestätigt werden. Sie lässt sich salopp dadurch begründen, dass die Randbedingungen symmetrisch sind und die approximierende Lösung  $v_{\mathcal{T}}$  für hinreichend große  $L_x$  keine großen Sprünge gegenüber der Fermi-Dirac-Statistik  $g(x)$  zeigt. Damit heben sich die beiden in  $\ell$  enthaltenen Terme am linken und rechten Rand in etwa auf. Numerische Experimente zeigen, dass ein Abweichen vom Upwind-Fluss mit dem Strafparameter  $\kappa = |\Lambda|/2$  hin zu kleineren  $\kappa$  zur Instabilität des transienten Systems führen. Da  $\kappa$  unmittelbar mit  $\lambda_{\min}$  korreliert, ist dies ein weiteres Indiz für die Gültigkeit der Ungleichung (3.28) sowie der getroffenen Annahme.

Eine ähnliche Stabilitätsanalyse wird in der Literatur [38] vorgenommen mit dem entscheidenden Unterschied, dass dort periodische Randbedingungen angenommen werden, sodass sich die beiden Terme tatsächlich exakt aufheben.

Zusammenfassend bleibt respektive der Ungleichung (3.28) die wichtige Erkenntnis, dass zwei Faktoren die Stabilität des Verfahrens ermöglichen. Dies sind erstens der Strafterm  $|\Lambda|/2 \llbracket v \rrbracket$  des numerischen Flusses und zweitens das CAP aus Abschnitt 2.4.3.

#### 3.3.5 Implementierung

Die Implementierung richtet sich in wesentlichen Zügen an der Ausarbeitung des dritten Kapitels des eingangs erwähnten Buches [34]. Im Folgenden werden die wichtigsten Punkte zusammengefasst. Das DG-Verfahren wird dabei der Einfachheit halber zunächst als eindimensional angesehen mit  $v_{\mathcal{T}} \in X_{\mathcal{T},1}$ . An relevanten Stellen wird die Einbettung in das System mit  $v_{\mathcal{T}} \in X_{\mathcal{T}}$  berücksichtigt, vergleiche Gleichung (3.19).

Die Ritz-Approximation  $v_{\mathcal{T}} \in X_{\mathcal{T},1}$  ist lokal definiert. *Lokal* bedeutet hier stets eine elementweise Betrachtung für jedes Element  $D^k$ . Wie in jedem FEM-Verfahren überführt die affine Abbildung

$$x \in D^k : \quad x(r) = x_{k-1/2} + \frac{1+r}{2} h_k, \quad h_k = x_{k+1/2} - x_{k-1/2} \quad (3.29)$$

### 3.3 Discontinuous-Galerkin-Verfahren für die Liouville-von-Neumann-Gleichung

die lokalen Integrale auf ein Referenzelement  $I = [-1, 1]$  mit  $r \in I$ . Es wird dann zwischen *modaler Darstellung*

$$x \in D^k : \quad v_{\mathcal{T}}^k(r(x), t) = \sum_{n=1}^{N_p} \hat{v}_{\mathcal{T},n}^k(t) \Phi_n(r)$$

und *nodaler Darstellung*

$$x \in D^k : \quad v_{\mathcal{T}}^k(r(x), t) = \sum_{i=1}^{N_p} v_{\mathcal{T},i}^k(t) \ell_i(r) \quad (3.30)$$

der Ritz-Approximation unterschieden. Dabei sind  $\Phi_n(r)$  bzw.  $\ell_i(r)$  verschiedene Basisfunktionen des Polynomraumes  $P_N(I)$  (siehe auch Gleichung (3.19)). Für das System hat  $v_{\mathcal{T}}^k(x, t)$  gerade  $K_y$  Komponenten. Die entsprechenden Koeffizienten bekommen dann einen weiteren Index  $v_{\mathcal{T},i}^k \rightarrow v_{\mathcal{T},i}^{k,j}$  mit  $j = 1, \dots, K_y$ .

Die nodale Darstellung bietet den Vorteil, dass die Funktion nicht unbedingt ausgewertet werden muss, da  $v_{\mathcal{T}}^k(x(\xi_i), t)$  durch die Entwicklungskoeffizienten  $v_{\mathcal{T},i}^k(t)$  bereits gegeben ist. Es handelt sich hierbei also um eine interpolatorische Darstellung. Eine hierfür geeignete Basis sind die Lagrange-Polynome

$$\ell_i(r) = \prod_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^{N_p} \frac{r - \xi_j}{\xi_i - \xi_j} \quad (3.31)$$

mit  $N_p$  verschiedenen Knotenpunkten  $\xi_j \in [-1, 1]$  und der Eigenschaft  $\ell_i(\xi_j) = \delta_{ij}$ . Für eine Verallgemeinerung in höherdimensionale Probleme bietet es sich an, die benötigten Integrale über die Basisfunktionen mit Hilfe der modalen Basis  $\Phi$  zu kalkulieren, da die Lagrange-Polynome sich nicht auf einfache Weise formulieren lassen. Für diese modale Basis wird für eine gute Konditionierung der Massenmatrix (vergleiche Def. 3.3.2) statt der Monombasis die orthonormierte Basis

$$\Phi_n(r) = \frac{P_{n-1}(r)}{\sqrt{2(2n+1)^{-1}}} \quad (3.32)$$

mit den Legendre-Polynomen  $P_n(r)$  gewählt. Der Zusammenhang zwischen nodaler und modaler Basis ist durch die *Vandermonde-Matrix*

$$\mathcal{V}_{ij} = \Phi_j(\xi_i) \quad (3.33)$$

gegeben. Es gilt dann

$$\mathcal{V}\hat{v}_{\mathcal{T}} = v_{\mathcal{T}} \quad \text{ sowie } \quad (3.34)$$

$$\mathcal{V}^T \ell(r) = \Phi(r) \quad \text{ mit } \quad (3.35)$$

$$\begin{aligned} \hat{v}_{\mathcal{T}} &= \left( \hat{v}_{\mathcal{T},1} \dots \hat{v}_{\mathcal{T},N_p} \right)^T, & v &= \left( v_{\mathcal{T},1} \dots v_{\mathcal{T},N_p} \right)^T \\ \ell(r) &= \left( \ell_1(r) \dots \ell_{N_p}(r) \right)^T, & \Phi(r) &= \left( \Phi_1(r) \dots \Phi_{N_p}(r) \right)^T, \end{aligned}$$

wobei der Index  $\mathcal{T}$  der Übersicht halber temporär unterdrückt worden ist. Der Zusammenhang gilt wegen der affinen Abbildung (3.29) für alle Elemente  $D^k$ , weshalb auch dieser Index unterdrückt worden ist.

Die Interpolationspunkte  $\xi_j$  werden derart gewählt, dass die Interpolation möglichst nahe an der bestmöglichen Ritz-Approximation durch ein (allgemeines) Polynom liegt. Dies führt auf die Legendre-Gauß-Lobatto-Quadraturpunkte. Besonders für hohe Polynomgrade  $N \geq 5$  ist diese Wahl zu favorisieren, denn äquidistante Knoten würden hier zu einer exponentiell schlecht konditionierten Interpolation führen. Ein weiterer Vorteil offenbart sich, wenn für die spätere Fehlerberechnung die Funktion über  $\Omega$  integriert werden muss. Hier bietet sich dann die Gauß-Lobatto-Quadratur an, sodass die Funktionsauswertung nach Gleichung (3.30) entfällt, da lediglich  $v_{\mathcal{T}}(\xi_j)$  benötigt wird und diese Funktionswerte gerade den Koeffizienten entsprechen.

Mit diesen Vorarbeiten kann nun die starke Formulierung 3.3.2 in eine Matrix-Vektor-Gleichung überführt werden. Die Forderung der Gültigkeit für alle Testfunktionen  $\varphi \in X_{\mathcal{T},1}$  übersetzt sich für einen  $N_p$ -dimensionalen Polynomraum in exakt  $N_p \times K_x$  Gleichungen. Für das gesamte System mit  $K_y$  Zellen in  $y$ -Richtung müssen sich entsprechend  $N_p \times K_x \times K_y$  Gleichungen ergeben. Dazu wird lokal als Testfunktion  $\varphi = \ell_m e_j$  gewählt mit dem Einheitsvektor  $e_j$ , wobei  $m = 1 \dots N_p$  und  $j = 1 \dots K_y$ . Für die weitere Notation sowie die Implementierung dient die folgende Definition.

**Definition 3.3.2** (Massen-, Steifigkeits- und Driftmatrix, Notation der Lösung). *Für die nodale Darstellung heißen*

$$\left( M^k \right)_{pq} \equiv \int_{x_{k-1/2}}^{x_{k+1/2}} \ell_p^k(x) \ell_q^k(x) dx = \frac{h_k}{2} \int_{-1}^1 \ell_p(r) \ell_q(r) dr \equiv \frac{h_k}{2} M_{pq}$$

*Massenmatrix,*

$$\left( S^k \right)_{pq} \equiv \int_{x_{k-1/2}}^{x_{k+1/2}} \ell_p^k(x) \frac{d\ell_q^k(x)}{dx} dx = \int_{-1}^1 \ell_p(r) \frac{d\ell_q(r)}{dr} dr \equiv S_{pq}$$

### 3.3 Discontinuous-Galerkin-Verfahren für die Liouville-von-Neumann-Gleichung

Steifigkeitsmatrix und

$$\left(\mathcal{G}^{k,jm}\right)_{pq} = \int_{D^k} G_{jm}(x) \ell_p^k(x) \ell_q^k(x) dx \quad \forall j, m = 1 \dots K_y$$

*Driftmatrix.* Dabei ist  $G_{jm}(x)$  die Matrixkomponente von  $G(x)$  aus Gleichung (3.15). Hier und in der folgenden Notation der Lösung ist die explizite Zeitabhängigkeit temporär unterdrückt worden. Die nodalen Entwicklungskoeffizienten der Lösung des Variationsproblems  $v_{\mathcal{T}}$  werden gemäß

$$\begin{aligned} \underline{v} &= \left(\underline{v}_1 \dots \underline{v}_{K_y}\right)^T && \text{mit} \\ \underline{v}_j &= \left(\underline{v}_j^1 \dots \underline{v}_j^{K_x}\right)^T && \text{mit} \\ \underline{v}_j^k &= \left(v_{\mathcal{T},1}^{k,j} \dots v_{\mathcal{T},N_p}^{k,j}\right)^T \end{aligned}$$

notiert und somit in einem globalen Vektor  $\underline{v} \in \mathbb{C}^s$  mit  $s = K_y K_x N_p$  zusammengefasst.

Genau wie die bereits für das System definierte Driftmatrix lassen sich auch  $M$  und  $S$  für das System definieren. Sie sind bezüglich der  $y$ -Richtung blockdiagonal gemäß  $\left(\mathcal{M}^{k,jm}\right)_{pq} = \delta_{jm} \left(M^k\right)_{pq}$  und  $\mathcal{S}$  analog. Die eingeführten Matrizen lassen sich durch die Vandermonde-Matrix  $\mathcal{V}$  ausdrücken. Die Zusammenhänge für Massen- und Steifigkeitsmatrix sind durch

$$\begin{aligned} M &= \left(\mathcal{V} \mathcal{V}^T\right)^{-1} \\ M^{-1} S &= \mathcal{V}_r \mathcal{V}^{-1} \quad \text{mit } (\mathcal{V}_r)_{ij} = \left. \frac{d\Phi_j}{dr} \right|_{\xi_i} \end{aligned}$$

gegeben, wobei im Wesentlichen die Orthonormiertheit der gewählten modalen Basis (3.32) eingegangen ist. Für die Driftmatrix wird im Anhang A.5 ein entsprechender Ausdruck hergeleitet. Es ist hierzu anzumerken, dass die Driftmatrix die einzige Kopplung bezüglich  $y$ -Richtung darstellt. Daher geht die Herleitung über eine eindimensionale Betrachtung des DG-Verfahrens und damit über die Ausführungen in [34] hinaus.

Prinzipiell gibt es verschiedene Möglichkeiten, den Driftterm zu behandeln. Da jedoch Funktionswerte von Ansatz- und Testfunktion bereits an den Gauß-Lobatto Quadraturpunkten vorliegen, bietet es sich an, diese Quadratur zu verwenden. Es wird im folgenden zwischen zwei Methoden unterschieden.

1. (Methode G1) Es lässt sich von vornherein das Produkt  $G(x) v_{\mathcal{T}}(x)$  in der nodalen Basis entwickeln. Dann ergibt sich für das resultierende Integral wieder

die Massenmatrix. In dem lokalen Schema verbleibt dann nach Multiplikation mit  $(M^k)^{-1}$  schlicht der Ausdruck  $\sum_{m=1}^{K_y} \text{diag}(\underline{G}_{jm}^k) \underline{v}_m^k$ . Die Driftmatrix aus Definition 3.3.2 findet hierbei keine Verwendung.

2. (Methode G2) Eine genauere Betrachtung belässt  $G(x)$  als analytisch bekannt, sodass die Driftmatrix mit Hilfe von Gauß-Lobatto-Quadratur höherer Ordnung berechnet werden kann. Mit der Quadraturordnung  $N_{GL}$  ergibt sich mit den dem Anhang A.5 zu entnehmenden Definitionen der Matrix  $W$  und der Gewichte  $w$

$$(\mathcal{G}^{k,jm})_{pq} = \sum_{a=1}^{N_{GL}} W_{ap} W_{ai} w_a G_{jm}(\xi_a^k) \frac{h_k}{2}. \quad (3.36)$$

Diese Methode ist insbesondere für unstetige Potentiale wie das Flachbandpotential in Abbildung 2.2 zu bevorzugen, da solche Unstetigkeiten besser durch Polynome höherer Ordnung approximiert werden.

Beide Ansätze sind numerisch anhand der resultierenden iterativen Fehler verglichen worden, siehe Kapitel 4.4. Es zeigt sich erwartungsgemäß, dass der zweite Ansatz zu besseren Konvergenzraten führt. Offensichtlich ist dies aber gleichzeitig die rechenintensivere Option.

Nun lässt sich das Variationsproblem 3.3.2 zunächst für festen Index  $j$  und innere Elemente lokal umschreiben gemäß

$$\begin{aligned} \forall D^k \in \mathcal{T} \setminus \{D^1, D^{K_x}\} : \\ \partial_t \underline{v}_j^k + (M^k)^{-1} S \underline{f}_j^k + \sum_{m=1}^{K_y} (M^k)^{-1} \mathcal{G}^{k,jm} \underline{v}_m^k \\ + \left( \frac{-\lambda_j + |\lambda_j|}{2} \right) \llbracket \underline{v}_j \rrbracket_{e_r} \underline{E}_r + \left( \frac{-\lambda_j - |\lambda_j|}{2} \right) \llbracket \underline{v}_j \rrbracket_{e_l} \underline{E}_l = 0 \end{aligned} \quad (3.37)$$

wobei die lokalen *Liftooperatoren*

$$\begin{aligned} \underline{E}_r &\equiv (M^k)^{-1} \underline{\ell}(x_{k+1/2}) = (M^k)^{-1} \cdot (0, \dots, 0, 1)^T \\ \underline{E}_l &\equiv (M^k)^{-1} \underline{\ell}(x_{k-1/2}) = (M^k)^{-1} \cdot (1, 0, \dots, 0)^T \end{aligned}$$

eingeführt worden sind. Die letzte Gleichheit ergibt sich für Polynomgrade  $N \geq 1$ , da  $\{x_{k-1/2}, x_{k+1/2}\} = \{\xi_1, \xi_{N_p}\}$  für die gewählten Gauß-Lobatto Quadraturpunkte. Der Sprung der Koeffizienten ist etwas fahrlässig notiert, um die Situation nicht



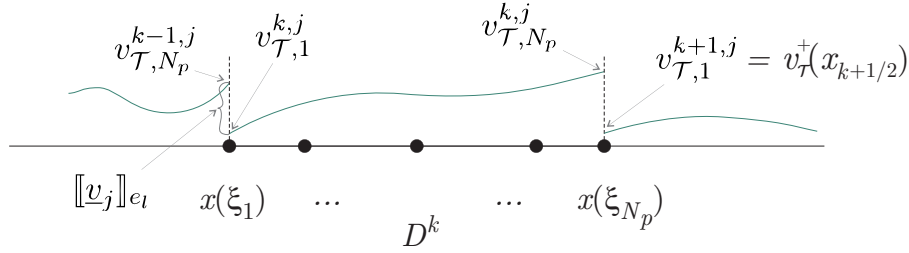
### 3.3 Discontinuous-Galerkin-Verfahren für die Liouville-von-Neumann-Gleichung

unnötig unleserlich zu gestalten. Es ist für innere Kanten

$$\llbracket v_j \rrbracket_{e_r} = v_{\mathcal{T}, N_p}^{k,j} - v_{\mathcal{T}, 1}^{k+1,j} \quad \text{und}$$

$$\llbracket v_j \rrbracket_{e_l} = v_{\mathcal{T}, 1}^{k,j} - v_{\mathcal{T}, N_p}^{k-1,j}$$

gesetzt worden gemäß der Definition (3.20). Dieser Ausdruck entspricht wegen der interpolatorischen Eigenschaft der Lagrange-Polynome exakt dem Sprung der Ritz-Approximation. Die Zusammenhänge werden in Abbildung 3.4 veranschaulicht. Für



**Abbildung 3.4** Notation der nodalen Darstellung für das eindimensionale DG-Verfahren. An den Knotenpunkten entspricht der Funktionswert gerade den Entwicklungskoeffizienten. Da für Gauß-Lobatto Knoten mit  $N_p \geq 2$  stets  $\xi_1 = -1$  und  $\xi_{N_p} = 1$  gilt, entspricht der Sprung von  $v_{\mathcal{T}}$  dem Sprung der Koeffizienten.

die beiden Randlelemente ergibt sich

$$\begin{aligned} & \partial_t v_j^{K_x} + \left(M^{K_x}\right)^{-1} S \underline{f}_j^{K_x} + \sum_{m=1}^{K_y} \left(M^{K_x}\right)^{-1} \mathcal{G}^{k,jm} v_m^{K_x} \\ & + \left(\frac{-\lambda_j + |\lambda_j|}{2}\right) v_{\mathcal{T}, N_p}^{K_x, j} \underline{E}_r + \left(\frac{-\lambda_j - |\lambda_j|}{2}\right) \llbracket v_j \rrbracket_{e_l} \underline{E}_l = \left(\frac{-\lambda_j + |\lambda_j|}{2}\right) g_j(x_r, t) \underline{E}_r \end{aligned} \quad (3.38)$$

$$\begin{aligned} & \partial_t v_j^1 + \left(M^1\right)^{-1} S \underline{f}_j^1 + \sum_{m=1}^{K_y} \left(M^1\right)^{-1} \mathcal{G}^{k,jm} v_m^1 \\ & + \left(\frac{-\lambda_j + |\lambda_j|}{2}\right) \llbracket v_j \rrbracket_{e_r} \underline{E}_r + \left(\frac{\lambda_j + |\lambda_j|}{2}\right) v_{\mathcal{T}, 1}^{1, j} \underline{E}_l = \left(\frac{\lambda_j + |\lambda_j|}{2}\right) g_j(x_l, t) \underline{E}_l. \end{aligned} \quad (3.39)$$

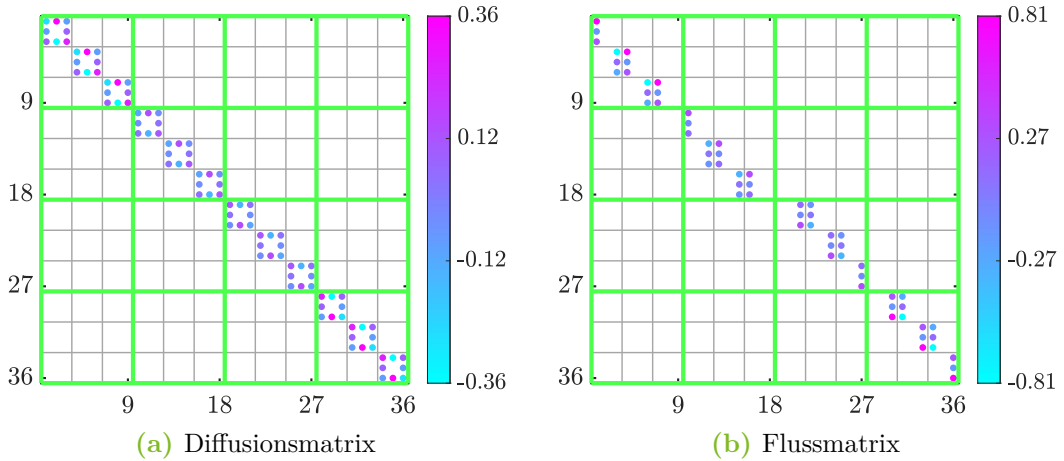
Die Gleichungen (3.37), (3.38), (3.39) werden in stationärer Form (das heißt  $\partial_t v = 0$ ) als globales Matrix-Vektor-System implementiert, sodass das lineare Gleichungssystem

$$\underline{\mathcal{A}} v = \underline{b} \quad (3.40)$$

resultiert mit der Systemmatrix  $\underline{\mathcal{A}}$  sowie dem Vektor  $\underline{b}$ , der sich aus der rechten Seite von (3.38) bzw. (3.39) ergibt und die Randbedingungen enthält. Zur Lösung des LGS wird die Matlab<sup>®</sup>-interne Methode *linsolve* verwendet. Die gesuchte stationäre Dichtematrix ergibt sich schließlich aus der Rücktransformation (3.14). Für die Zeitentwicklung wird dann ein explizites Zeitschrittverfahren angewandt, siehe Abschnitt 3.3.5.1.

Die Bestandteile der Systemmatrix werden in den folgenden Abbildungen für die Systemgröße  $\{K_x = 3, N_p = 3, K_y = 4\}$  exemplarisch gezeigt. Sie unterteilt sich in den Diffusionsterm  $(M^k)^{-1} S \Lambda$ , den Driftterm  $(M^k)^{-1} \mathcal{G}^k$  sowie den Flussterm, welcher die Kantenterme beinhaltet. Die Abbildungen sind zur Verbesserung der Lesbarkeit mit einer farblichen Struktur unterlegt. Dabei ist Definition 3.3.2 hilfreich. Die grünen Rahmen bedeuten fixierte  $y$ -Diskretisierung (Indizes  $j, m$  konstant). Die grauen Quadrate beranden ein Element der  $x$ -Diskretisierung ( $D^k$  konstant), worin wiederum die  $N_p \times N_p$  lokal definierten Matrizen  $M^k$ ,  $S^k$  und  $\mathcal{G}^{k,jm}$  zu sehen sind.

Abbildung 3.5a zeigt den Diffusionsterm. Wegen der um 0 symmetrisch verteilten



**Abbildung 3.5** Struktur der beiden Flussmatrizen in willkürlichen Einheiten. Die Bedeutung der farblich gekennzeichneten Blöcke ist im Text erklärt. Links sind die Volumenteile und rechts die ursprünglich aus der partiellen Integration entstammenden Kantenbeiträge abgebildet. In der Flussmatrix enthalten ist der numerische Fluss. Dieser bringt die einzigen Nebendiagonalbeiträge der Systemmatrix in  $x$ -Richtung ein und stellt somit die Kopplung zwischen Zellen dar.

Eigenwerte (3.12) ist diese Matrix rotations- oder doppelt spiegelsymmetrisch. Auch tendieren deshalb die nominellen Werte von außen Richtung Mitte der Matrix gegen 0. Innerhalb eines grün umrandeten Blocks entstehen bei äquidistanter Diskretisierung

$K_x$  Replika. Die Matrix ist blockdiagonal, da der entsprechende Term in Gleichung (3.16) bereits diagonal ist.

Eine ähnliche Struktur zeigt sich für die Flussmatrix in Abbildung 3.5b. Dieselbe Symmetrie ergibt sich aus denselben Gründen, jedoch finden sich in dieser Matrix die Kopplungen zwischen benachbarten Elementen wieder. Für die obere linke Hälfte ist  $\lambda_j > 0$ , sodass der numerische Fluss als Upwind Fluss Werte aus der linksseitigen Nachbarzelle einbezieht. Unten rechts ist  $\lambda_j < 0$  und es werden rechtsseitige Nachbarzellen berücksichtigt. Am Rand (oben links bzw. unten rechts) „fehlen“ Werte, welche in der rechten Seite als Randbedingung  $b$  wiederzufinden sind.

Abbildung 3.6 zeigt die Driftmatrix für verschiedene Fälle. Zunächst ist hierzu anzumerken, dass die Matrix den einzig komplexen Beitrag zur Systemmatrix liefert – gezeigt ist an dieser Stelle lediglich der Betrag. Das CAP liefert wesentliche Beiträge, was jedoch in diesem Beispiel der sehr groben Diskretisierung in  $y$ -Richtung geschuldet ist. Ferner ist die Hauptdiagonale für eine feinere Diskretisierung nicht unbesetzt wie die Grafik hingegen vermuten lässt. Bemerkenswert ist die nominelle Ähnlichkeit in Bezug auf die Hauptdiagonalen eines jeden grünen Quadrates zwischen Methode G1 und G2. Für Methode G2 kommen erwartungsgemäß Nebendiagonalbeiträge hinzu, siehe Gleichung (3.36). Für die Darstellung ist ein Flachbandpotential gemäß Abbildung 2.2 angesetzt worden, weshalb es zu weiteren erkennbaren Symmetrien in der Struktur kommt.

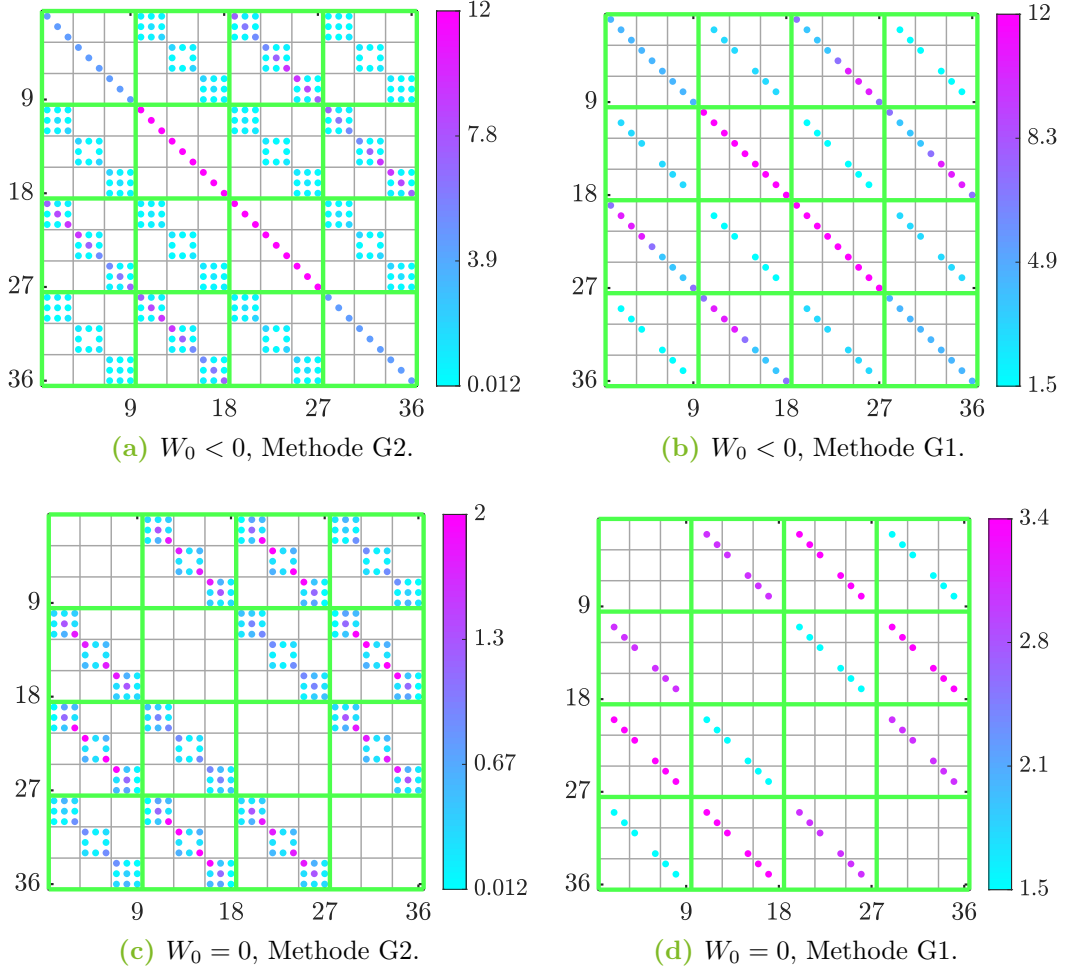
#### 3.3.5.1 Zeitentwicklung

Im transienten Fall ist  $\partial_t \neq 0$  und daher Gleichung (3.40) durch

$$\frac{d}{dt} \underline{v} = -\underline{\underline{A}} \underline{v} + \underline{b} \equiv \mathcal{F}(\underline{v}, t) \quad (3.41)$$

zu ersetzen. Dieser letzte Schritt überführt die semidiskrete Form aus Abbildung 3.1 (Punkt C) in die vollständig diskretisierte Form (Punkt D). In der Herleitung des stationären Schemas aus dem vorherigen Abschnitt ist die Gleichung lokal bereits mit  $(M^k)^{-1}$  multipliziert worden. Da die Massenmatrix bezüglich der DG-Diskretisierung blockdiagonal ist, ist die Invertierung besonders einfach, weshalb bei DG-Verfahren in aller Regel explizite Zeitschrittverfahren zur Anwendung kommen. Dies stellt einen Vorteil gegenüber einem CG-Verfahren dar, wo die globale Massenmatrix nicht blockdiagonal ist, vergleiche auch Kapitel 3.1. Gegenüber impliziten Verfahren sind die expliziten Verfahren in der Regel schneller [39].

Deshalb sind in der vorliegenden Arbeit zur Lösung des Systems gewöhnlicher Differentialgleichungen (3.41) Runge-Kutta Verfahren (RK)-Verfahren der Ordnung



**Abbildung 3.6** Betrag der Driftmatrix für verschiedene Fälle in willkürlichen Einheiten. Die beiden linken Teile sind mit Gauß-Lobatto Quadratur berechnet, rechtsseitig ist das Produkt  $G(x) v_{\mathcal{T}}(x)$  in der nodalen Basis entwickelt worden (siehe oben). Für die beiden oberen Teile ist das CAP eingeschaltet (vgl. (2.32)), unten ist es ausgeschaltet.

### 3.3 Discontinuous-Galerkin-Verfahren für die Liouville-von-Neumann-Gleichung

zwei und vier (RK2 und RK4) implementiert worden. Zu Testzwecken ist dabei das Verfahren zweiter Ordnung als *strong stability preserving* ausgelegt (siehe hierzu [34]), das heißt es erhält die sogenannte TVDM-Eigenschaft:

$$\sum_{D^k \in \mathcal{T} \setminus D^{K_x}} |\bar{v}_{\mathcal{T}}^{k+1,n+1} - \bar{v}_{\mathcal{T}}^{k,n+1}| \leq \sum_{D^k \in \mathcal{T} \setminus D^{K_x}} |\bar{v}_{\mathcal{T}}^{k+1,n} - \bar{v}_{\mathcal{T}}^{k,n}|.$$

Hierbei ist  $\bar{v}_{\mathcal{T}}^{k,n}$  der Mittelwert von  $v_{\mathcal{T}}$  in Zelle  $k$  im Zeitschritt  $n$ . Dazu werden *Limiter* hinzugeschaltet, die nach jedem Zeitschritt die Steigung der Lösung innerhalb der Zellen leicht korrigiert, um diese Eigenschaft zu garantieren. Mit solchen Verfahren sollen unphysikalische Überschwinger vor Allem bei nichtlinearen PDGn mit unstetigen Lösungen verhindert werden. Näheres ist in der Literatur [34] zu finden.

Das RK2-Verfahren genügt der Vorschrift

$$\begin{aligned} p^{(1)} &= v_{\mathcal{T}}^n + \Delta t \mathcal{F}(v_{\mathcal{T}}^n, t^n) \\ v_{\mathcal{T}}^{n+1} &= \frac{1}{2} \left( v_{\mathcal{T}}^n + p^{(1)} + \Delta t \mathcal{F}(p^{(1)}, t^n + \Delta t) \right), \end{aligned}$$

wobei die Länge eines Zeitschrittes in Abhängigkeit von Polynomgrad  $N$  der DG-Diskretisierung sowie den Gitterabständen  $h_x$  (als Mittelwert der  $h^k$ ) und  $h_y$  gewählt werden sollte. Hierzu gibt es keine analytische Vorschrift, sondern es gilt die Abschätzung [34]

$$\Delta t \leq \frac{1}{2N+1} c \frac{h_x}{h_y \max(\Lambda)} \quad (3.42)$$

mit einer Konstanten  $c$ , die durch numerische Experimente für das RK2-Verfahren zu  $c = 0.2$  und für das RK4-Verfahren entsprechend verdoppelt zu  $c = 0.4$  gewählt wird. Das RK4-Verfahren wird in der geläufigen speicherarmen Version

$$\begin{aligned} p^{(0)} &= v_{\mathcal{T}}^n \\ \forall i \in [1, \dots, 5] \quad q^{(i)} &= a_i q^{(i-1)} + \Delta t \mathcal{F}(p^{(i-1)}, t^n + c_i \Delta t) \\ p^{(i)} &= p^{(i-1)} + b_i q^{(i)} \\ v_{\mathcal{T}}^{n+1} &= p^{(5)} \end{aligned}$$

implementiert. Die Koeffizienten  $a_i, b_i, c_i$  können der Literatur [34] entnommen werden. Offenbar werden in dieser Variante fünf Funktionsaufrufe benötigt, was zunächst gegenüber der Ordnung des Verfahrens einen Mehraufwand bedeutet. Dadurch jedoch können größere Zeitschritte  $\Delta t$  realisiert werden [34].

## 4 Ergebnisse

In diesem Kapitel werden die Ergebnisse numerischer Experimente für das Schema aus Abschnitt 3.3 vorgestellt. Tabelle 4.1 listet die einstellbaren Parameter mit einer kurzen Beschreibung und ihren Default-Werten auf. Offenbar entsteht eine große

**Tabelle 4.1** Einstellbare Parameter und ihre Default-Werte.

Symbol	Beschreibung	Default
<i>Physikalische Parameter</i>		
$L_x$	Länge des Rechengebietes in $x$ -Richtung	106 nm
$L_y$	Länge des Rechengebietes in $y$ -Richtung	130 nm
$L_D$	Ausdehnung des Spannungsabfalls (s. Abbildung 2.2)	26 nm
$L_1$	Abstand der Potentialbarrieren (s. Abbildung 2.2)	6 nm
$L_2$	Breite der Potentialbarrieren (s. Abbildung 2.2)	4 nm
$V_0$	Barrierrhöhe (Differenz der Leitungsbandkantenenergien)	0.2098 eV
$N_D$	Donatorkonzentration des GaAs	$10^{24} \text{ m}^{-3}$
$m$	Effektive Elektronenmasse in GaAs	$0.063m_e$
$\mu$	Chemisches Potential (wird errechnet, siehe Abschnitt A.3)	46 meV
$\delta$	Einflussbereich des accap, siehe Gleichung (2.32)	$0.2L_y$
$W_0$	Stärke des CAP, siehe Gleichung (2.32)	$-1V_0$
$U$	Spannung, die über die Strecke $L_D$ abfällt	0 V
<i>Parameter der Numerik</i>		
$K_x$	# Zellen der DG-Diskretisierung	60
$K_y$	# Zellen der FV-Diskretisierung	100
$N$	Polynomgrad der DG-Diskretisierung	2
$N_q$	Quadraturordnung für Methode G2	20
$\kappa$	Strafparameter des numerischen Flusses, siehe Gleichung (3.24)	1/2
<i>Parameter des Programmablaufs</i>		
doGL	Soll Methode G2 verwendet werden?(sonst G1) Die Quadraturordnung ist stets 20.	true
doPotConv	Soll das Potential mit einer Gaußverteilung gefaltet werden?	false
withCAP	Soll das CAP eingeschaltet werden?	true
doTransient	Soll transient gerechnet werden?	false
doGummel	Soll selbstkonsistent gemäß den Erläuterungen in Kapitel A.4 gerechnet werden?	false
Nrefine	# Verfeinerungen in der Polynomordnung $N$ mit $N_{i+1} = N_i + 1$	0
Krefine	# Verfeinerungen in der Anzahl Elemente $K_x$ mit $K_{x,i+1} = 2K_{x,i}$	0

Variationsmöglichkeit. Zunächst soll jedoch im nächsten Abschnitt die Funktionalität des Schemas getestet werden für ein analytisch lösbares Randwertproblem. Daraufhin wird die stationäre Lösung näher untersucht. Der mit der Elektronendichte korrespondierende Realteil sowie der mit dem Strom korrespondierende Imaginärteil werden für verschiedene Spannungen gezeigt. Aus einer Mittlung des Stromes über  $x$  ergibt sich der Gesamtstrom in Abhängigkeit von der Spannung. Hierfür soll in Kapitel 4.3 insbesondere der Einfluss der physikalischen Längen sowie die Übereinstimmung mit der Erwartung gemäß Abbildung 2.1b untersucht werden. Besonders interessant sind darüber hinaus Fehlerraten, die eine Aussage über die Qualität des

verwendeten Verfahrens liefern. Dazu wird in Kapitel 4.4 einerseits ein Vergleich mit der TM aus Kapitel 2.5.1 gezogen, andererseits eine iterative Fehlerrate definiert. Abgeschlossen wird das Kapitel durch eine Untersuchung der transienten Lösung in Abschnitt 4.5.

## 4.1 Notation

Für numerische Untersuchungen ist die Definition eines *analytischen Fehlers*

$$e_{i/r}^\alpha = \|\text{Im/Re}(u - u_{\mathcal{T}}^\alpha)\|_{L^2(\Omega)} \quad (4.1)$$

sowie eines *iterativen Fehlers*

$$e_{\mathcal{T},i/r}^\alpha = \left\| \text{Im/Re} \left( u_{\mathcal{T}}^\alpha - u_{\mathcal{T}}^{\alpha-1} \right) \right\|_{L^2(\Omega)}$$

sinnvoll, wobei  $\Omega = \Omega_x \times \Omega_y$  das Rechengebiet,  $u$  die exakte Lösung und  $u_{\mathcal{T}}$  die Ritz-Approximation sind. Der Index  $\alpha > 0$  bezieht sich auf die Verfeinerung des Gitters in  $x$ -Richtung gemäß  $K_x^\alpha = 2^\alpha$ . Wenn nicht anders angegeben, werden die benötigten Integrale in  $x$ -Richtung mit Gauß-Lobatto Quadratur der Ordnung  $N$  (also gleich der Ordnung des DG-Verfahrens) berechnet. In  $y$ -Richtung hingegen wird schlicht  $\int_{\Omega_y} dy f(y) \approx \sum_{j=1}^{K_y} h_y f(y_j)$  berechnet, da  $f(y)$  im FV-Verfahren konstant ist innerhalb der Zelle  $j$ .

Zur Analyse der *Konvergenzordnung* in Abschnitt 4.4 werden ferner die Fehlerraten

$$\begin{aligned} r_{i/r}^\alpha &= \frac{\ln(e_{i/r}^\alpha) - \ln(e_{i/r}^{\alpha-1})}{\ln(K_x^{\alpha-1}) - \ln(K_x^\alpha)} \quad \text{und} \\ r_{\mathcal{T},i/r}^\alpha &= \frac{\ln(e_{\mathcal{T},i/r}^\alpha) - \ln(e_{\mathcal{T},i/r}^{\alpha-1})}{\ln(K_x^{\alpha-1}) - \ln(K_x^\alpha)} \end{aligned} \quad (4.2)$$

definiert. Daraus lassen sich noch  $r_{i/r}$  bzw.  $r_{\mathcal{T},i/r}$  als Mittelwerte über  $\alpha$  errechnen. Die Definition der Fehlerrate ist motiviert durch eine Fehlerabschätzung der Form  $e \leq ch_x^r$ . Logarithmieren und Subtrahieren für zwei verschiedene mittlere Gitterabstände  $h_x$  liefert die Konvergenzordnung  $r$ .

Wann immer die numerische Lösung  $u_{\mathcal{T}}$  ausgewertet werden muss, sind die Gleichungen (3.35) und (3.33) hilfreich. Sei nun  $u_{\mathcal{T}}$  an der Stelle  $x_0$  auszuwerten. Dann ist zunächst das Element  $D^k$  zu suchen, für das  $x_0 \in D^k$  gilt. Durch Gleichung (3.29)

ergibt sich hieraus  $r_0$  als Koordinate auf dem Referenzelement  $I$ . Dann gilt nach Gleichung (3.30)

$$\begin{aligned} v_{\mathcal{T}}(x_0) &= v_{\mathcal{T}}^k(r_0, t) = \sum_{j=1}^{N_p} v_{\mathcal{T},j}^k(t) \ell_j(r_0) \\ &\stackrel{(3.35)}{=} \sum_{j=1}^{N_p} v_{\mathcal{T},j}^k(t) \left( (\mathcal{V}^T)^{-1} \Psi(r_0) \right)_j. \end{aligned}$$

Jetzt wird eine weitere Vandermonde-Matrix  $\tilde{\mathcal{V}}$  der Dimension  $1 \times N_p$  eingeführt, um den Punkt  $r_0$  zu errechnen. Nach Gleichung (3.33) ist also  $\tilde{\mathcal{V}}_{1j} = \Psi_j(r_0)$ . Dann folgt

$$\begin{aligned} v_{\mathcal{T}}(x_0) &= \sum_{i=j}^{N_p} v_{\mathcal{T},j}^k(t) \left( (\mathcal{V}^T)^{-1} \tilde{\mathcal{V}}^T \right)_{j,1} \\ &= (\tilde{\mathcal{V}} \mathcal{V}^{-1}) \underline{v}_j^k(t), \end{aligned}$$

wobei im letzten Schritt die Definition 3.3.2 sowie die Vertauschbarkeit von Invertierung und Transponierung einer Matrix eingegangen sind. Falls  $r_0 \in \{-1, 1\}$ , so ist  $u_{\mathcal{T}}$  auf einer Kante auszuwerten. An diesen Stellen wird der numerische Fluss verwendet. Anhand des Vorzeichens des zu  $y_j$  korrespondierenden Eigenwerts  $\lambda_j$  aus Gleichung (3.12) wird entweder  $u_{\mathcal{T}}^+$  oder  $u_{\mathcal{T}}^-$  ausgewertet, siehe auch Abbildung 3.3.

Die soeben angestellten Überlegungen zur Auswertung der numerischen Lösung mögen aufwändig erscheinen. Wenn jedoch Fehlerraten bestimmt werden sollen, ist die exakte Auswertung nach Ansicht des Autors unerlässlich. Eine interpolatorische Bestimmung der  $L^2$ -Norm führt ansonsten zu Abweichungen. Insbesondere für grobe Diskretisierungen (also kleine Werte von  $K_x$ ,  $N$ ) sind diese deutlich zu spüren.

Eine letzte Bemerkung betrifft die Einheiten der Orte und Zeiten in den folgenden Abbildungen. Die Skalierung ist durch Gleichung (2.19) gegeben und lässt sich berechnen, indem die effektive Masse als konstant

$$m = 0,063m_0 = 0,063 \cdot 9,1 \cdot 10^{-31} \text{ kg}$$

angenommen wird. Damit ergibt sich folgende Skalierung zwischen SI-Einheiten und den eingeführten einheitenlosen Größen:

$$\begin{aligned} V_0 &= 0,2098 \text{ eV} \\ \xi &= 2,40 \cdot 10^{-9} \text{ m} \\ \tau &= 3,14 \cdot 10^{-15} \text{ s}. \end{aligned} \tag{4.3}$$



## 4.2 Test für ein analytisch lösbares Randwertproblem

Losgelöst von der physikalischen LNG wird in diesem Abschnitt für Testzwecke die Gleichung (3.10) mit

$$\begin{aligned} A^y &= 0 \\ B_{j,j}^y &= -1/a(y_j) \quad \text{mit } a(y) = \sin\left(\frac{2\pi y}{L_y}\right) \\ C_{j,j}^y &= i \end{aligned}$$

mit äquidistanten  $y_1, \dots, y_{K_y} = -L_y/2, \dots, L_y/2$  betrachtet. Unter den Randbedingungen

$$u(x, y)|_{\partial\Omega} = \exp(ia(y)x)$$

entspricht die analytische Lösung der Gleichung (3.10) eben dieser Funktion, also  $u(x, y) = \exp(ia(y)x)$  auf ganz  $\Omega$ . Für die diagonalisierte Gleichung (3.16) ist mit  $v_t = 0$  die Geschwindigkeit  $\Lambda^y = B^y$  und der Driftoperator  $G = C^y$ . Die Systemmatrix aus Abschnitt 3.3.5 wird entsprechend angepasst.

Nun liegt der sehr einfache Fall von  $K_y$  entkoppelten Advektions-Reaktions Gleichungen vor. Aus der umfangreichen Literatur kann beispielsweise in [42] die *a priori* Fehlerabschätzung

$$e \leq ch_x^{N_x+1} \quad (4.4)$$

gefunden werden, falls  $u \in H^{N_x+2}$  liegt, was für die obige Lösung in der Tat gilt. Diese Konvergenzordnung ist optimal und lediglich für reinen Upwind Fluss in linearen Problemen gültig. Die Abbildung 4.1 zeigt die im vorherigen Abschnitt definierten Fehler in Abhängigkeit von Polynomgrad und Anzahl der Elemente. Es zeigt sich optimale Konvergenz nach Gleichung (4.4) mit

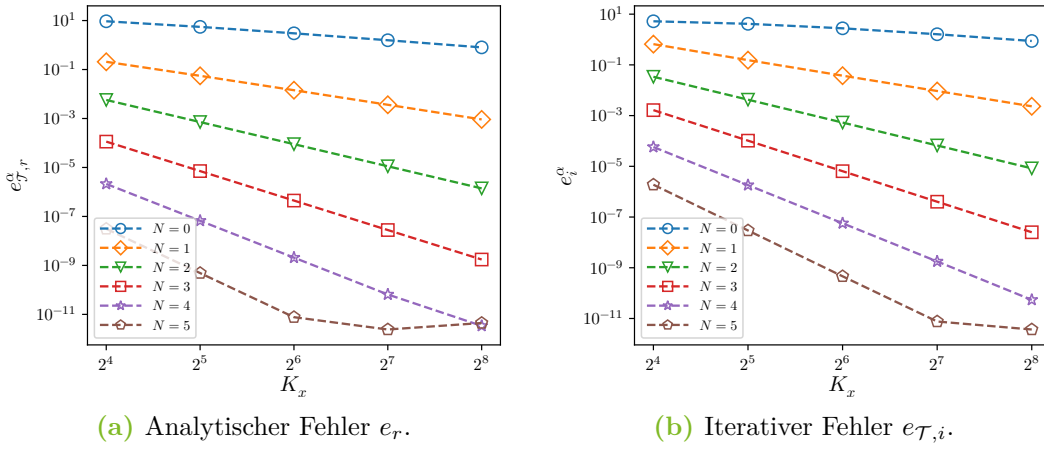
$$r_r = \{0.86 \pm 0.07, 1.94 \pm 0.03, 3.0 \pm 0.0, 4.0 \pm 0.0, 5.0 \pm 0.0, 4.55 \pm 2.04\}$$

$$r_i = \{0.83 \pm 0.08, 1.95 \pm 0.03, 3.0 \pm 0.0, 4.0 \pm 0.0, 5.0 \pm 0.0, 4.6 \pm 1.97\}$$

$$r_{\mathcal{T},r} = \{0.63 \pm 0.16, 2.06 \pm 0.05, 3.0 \pm 0.0, 4.0 \pm 0.0, 5.0 \pm 0.0, 5.97 \pm 0.04\}$$

$$r_{\mathcal{T},i} = \{0.57 \pm 0.18, 2.05 \pm 0.04, 3.0 \pm 0.0, 4.0 \pm 0.0, 5.0 \pm 0.0, 5.97 \pm 0.04\}$$

jeweils für  $N = \{0, \dots, 5\}$ . Imaginärteil und Realteil zeigen keine erkennbaren Unterschiede auf. Der Einbruch für feine Diskretisierungen ist der endlichen CPU-Genauigkeit zuzuschreiben.



**Abbildung 4.1** Fehler in Abhängigkeit von Polynomgrad  $N$  und Anzahl Elemente  $K_x = 2^\alpha$  mit  $K_y = 50$ . Die Steigung der Geraden stellt die Fehlerrate dar, welche hier optimal ist. Bei  $e \approx 10^{-11}$  ist offenbar die CPU-Genauigkeit erreicht.

### 4.3 Observablen der stationären Lösung

Die in Kapitel 2.1 eingeführten Observablen der Teilchendichte  $n(x, t)$  nach Gleichung (2.7) und der Stromdichte  $j(x, t)$  nach Gleichung (2.8) lassen sich aus der Dichtematrix auf einfache Weise gewinnen. Für die Stromdichte wird noch eine Ableitung bezüglich  $y$  benötigt. Hierfür wird der Differenzenquotient gemäß

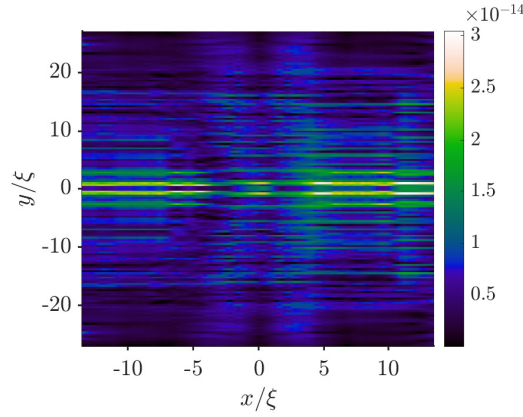
$$\partial_y u_{\mathcal{T}}(x, y, t)|_{y=0} \approx \frac{1}{h_y} \left( u_{\mathcal{T}}(x, y_{K_y/2+1}, t) - u_{\mathcal{T}}(x, y_{K_y/2}, t) \right) \quad (4.5)$$

gebildet. Da  $K_y$  stets gerade gewählt wird, liegt die Kante zwischen den Elementen  $K_y/2 + 1$  und  $K_y/2$  genau bei  $y = 0$ .

#### 4.3.1 Dichtematrix

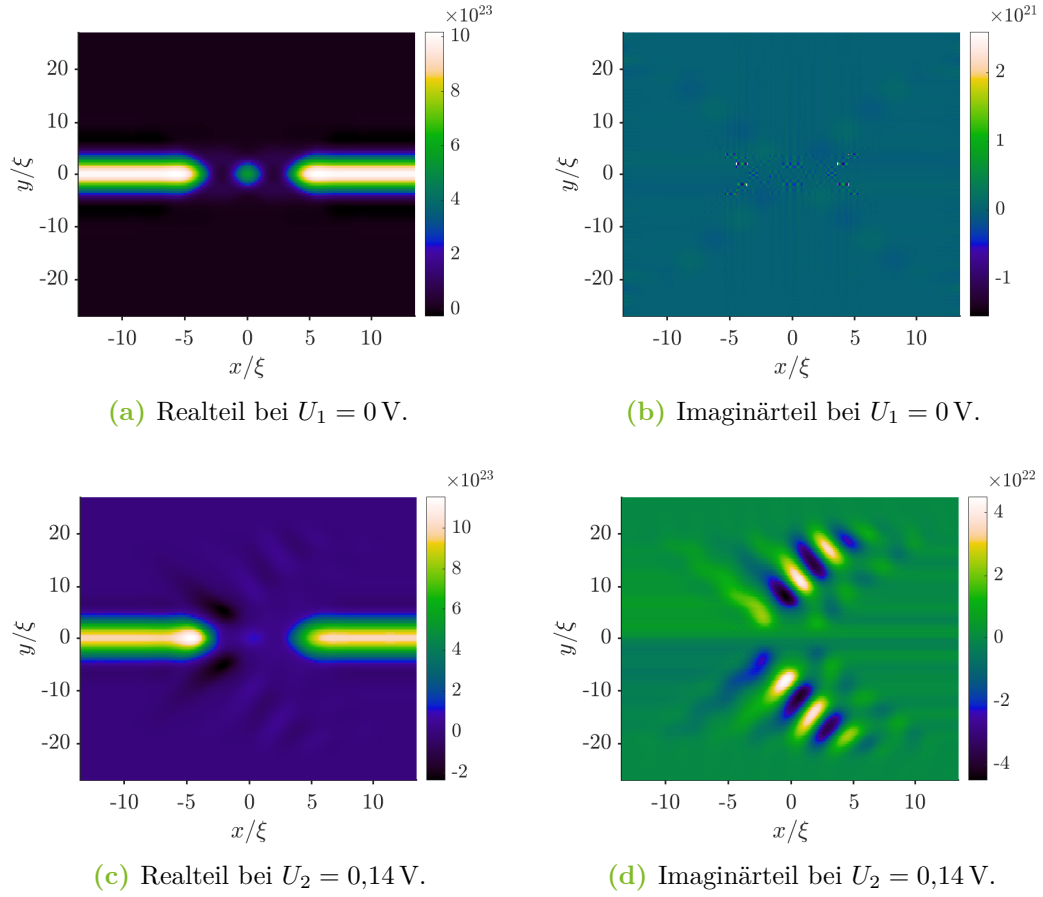
Ein erster Test des Verfahrens überprüft die Symmetrieeigenschaften der numerischen Lösung. Mit Hilfe von Gleichung (2.16) ist in Kapitel 2.4 gezeigt worden, dass die exakte Lösung im stationären Fall  $u(x, y) = -u^*(x, -y)$  erfüllt. Dies ist letztlich die Konsequenz der in Kapitel 2.1 gezeigten Hermitizität des Dichteoperators. Die Differenz  $(u_{\mathcal{T}}(x, y) - u_{\mathcal{T}}^*(x, -y)) / \|u_{\mathcal{T}}(x, y)\|_{L^2(\Omega)}$  ist in Abbildung 4.2 gezeigt.

Abbildung 4.3 zeigt Real- und Imaginärteil der numerischen Lösung für zwei Spannungen  $U_1 = 0 \text{ V}$ ,  $U_2 = 0,14 \text{ V}$ . Zum Vergleich ist in Abbildung 4.4 das analoge

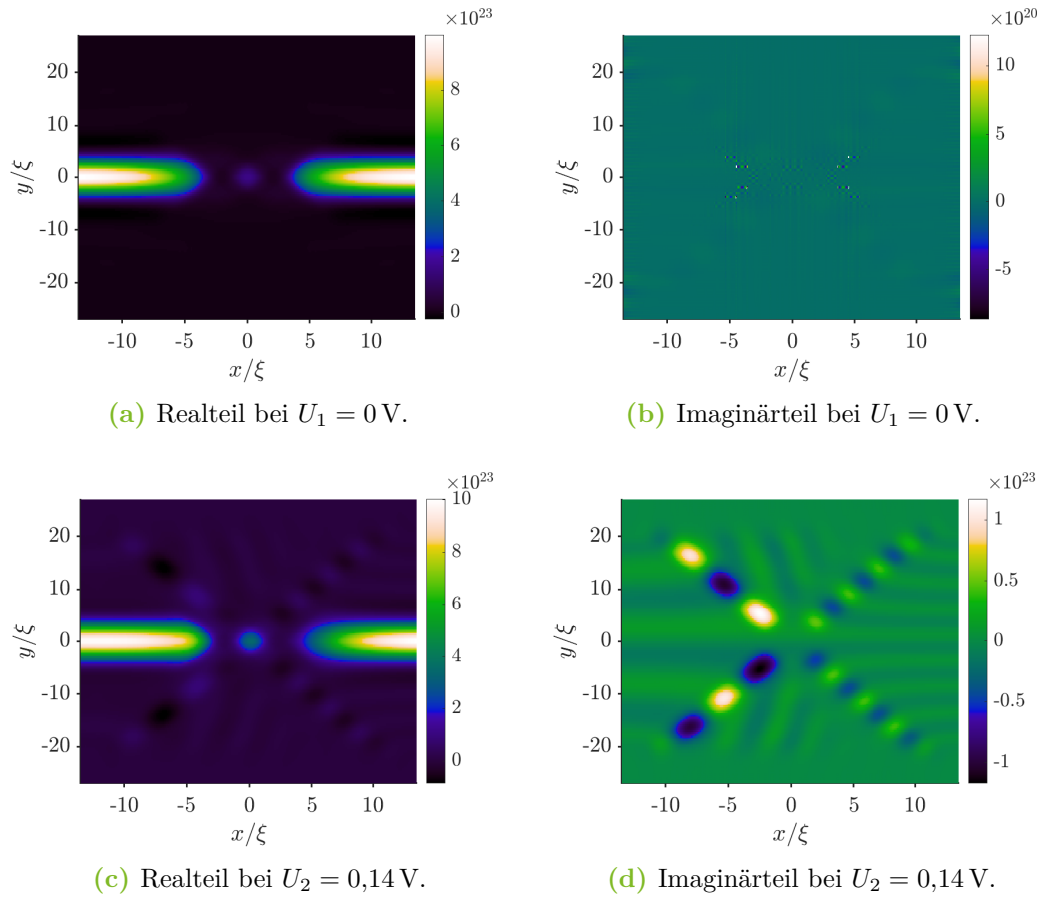


**Abbildung 4.2** Dargestellt ist die Differenz  $|u_{\mathcal{T}}(x, y) - u_{\mathcal{T}}^*(x, -y)| / N_D$ . Die Symmetrieanforderung wird bis auf CPU-Genauigkeit erfüllt.

Ergebnis einer selbstkonsistenten Rechnung (vgl. Kapitel A.4) zu sehen. Die gezeigten Ergebnisse decken sich qualitativ mit den Ergebnissen anderer Verfahren wie einem FV/FV-Hybridverfahren in [4] oder einem Upwind-Differenzen-Schema für die Wignerleichung wie in [3]. Ein quantitativer Vergleich wird in Kapitel 4.4 mit Hilfe der TM aus Kapitel 2.5.1 vorgenommen. Ein Nachteil zeigt sich für den Imaginärteil im Gleichgewichtsfall bei  $U_1 = 0$  V. Andere Verfahren (QTBM und TM) legen nahe, dass der Imaginärteil bis auf CPU-Genauigkeit verschwinden sollte, was hier nicht bestätigt werden kann. Feinere Diskretisierungen verbessern zwar die Resultate diesbezüglich, jedoch konnte aufgrund begrenzter Rechenkapazität ein nomineller Unterschied zwischen Real- und Imaginärteil von ca. vier Größenordnungen nicht überschritten werden.



**Abbildung 4.3** Numerische Lösung für zwei verschiedene Spannungen, aufgeteilt in Imaginär- und Realteil. Parameter der Numerik:  $K_x = 30$ ,  $N = 4$ ,  $K_y = 150$ . Physikalische Parameter:  $L_x = 66$  nm. Die Lösung wird an  $400 \times 400$  äquidistant verteilten Punkten exakt ausgewertet.



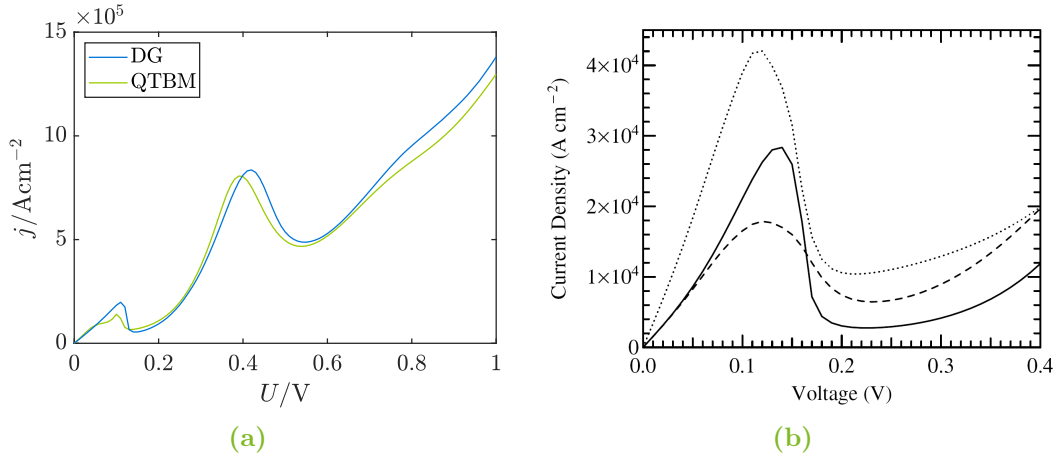
**Abbildung 4.4** Selbstkonsistente Rechnung mit ansonsten gleichen Parametern wie in Abbildung 4.3.

### 4.3.2 Strom-Spannungs-Kennlinien

Für einen qualitativen Vergleich werden im Folgenden Ergebnisse einer QTBM-Rechnung (siehe [32]) mit einbezogen. Da die selbstkonsistente Rechnung für angelegte Spannungen keine gute Konvergenz zeigt, beschränken sich die Berechnungen auf Flachband-Modelle gemäß Abbildung 2.2. Für den stationären Fall gilt wegen Gleichung (2.18) theoretisch  $\partial_x j(x) = 0$ . Die numerischen Experimente zeigen jedoch, dass diese Forderung nicht perfekt eingehalten werden kann, siehe zum Beispiel Abbildung 4.8d. Eine mögliche Erklärung hierfür ist in der  $y$ -Diskretisierung zu finden, denn die Ableitung nach Gleichung (4.5) stellt lediglich eine grobe Näherung dar. Weitere Verfahren könnten eine  $y$ -Diskretisierung mit analytischer Ableitung<sup>1</sup> implementieren, wie zum Beispiel ein FEM-Verfahren. Da also  $j(x, t \rightarrow \infty)$  nicht konstant ist entlang  $x$ , wird ein Strom  $j$  als Mittelwert gemäß

$$j \equiv \frac{1}{L_x} \int_{\Omega_x} dx j(x, t \rightarrow \infty)$$

definiert. Durch Iteration über verschiedene Spannungen ergibt sich die charakteristische Strom-Spannungs-Kennlinie einer RTD, wie in Abbildung 4.5a zu sehen ist. Dabei ist für die QTBM-Rechnung derselbe Parametersatz gewählt worden,

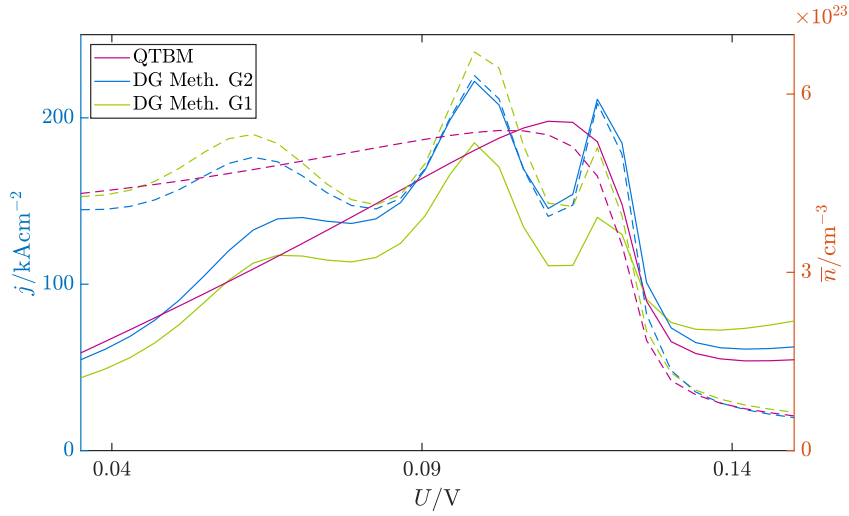


**Abbildung 4.5** Strom-Spannungs-Kennlinien im Vergleich. Parameter der Numerik:  $K_x = 30$ ,  $N = 7$ ,  $K_y = 280$ . Zusätzlich gezeigt ist das Ergebnis einer QTBM-Rechnung. Die Grafik rechts ist aus [13] entnommen. Die durchgezogene Linie ist das Resultat einer Tunneltheorie-Rechnung. Für die gestrichelte Linie wird eine lokale Variation der effektiven Masse berücksichtigt. Die gepunktete Linie schließlich stellt das Ergebnis eines Modells mit nicht-lokaler effektiver Masse dar.

<sup>1</sup>Eine analytische Ableitung kann mit stetigen Basisfunktionen gewährleistet werden.

während für die Grafik aus der Literatur [13] andere Parameter eingestellt sind. Es ist ersichtlich, dass die beiden Resonanzen bei ca. 0,11 V und 0,4 V reproduziert werden mit dem entwickelten DG-Verfahren. Die Abbildung 4.5b belegt dabei, dass sowohl Position als auch Höhe der Peaks abhängig sind von der zugrunde liegenden Theorie.

Auch innerhalb des DG-Verfahrens gibt es einige variable Parameter, siehe Tabelle 4.1. So lässt sich beispielsweise zwischen Methode G1 und G2 umschalten. Die entstehenden Unterschiede zeigt Abbildung 4.6 bei ansonsten gleichen Parametern. Anscheinend führt eine Approximation des Driftterms in höherer Ordnung zu



**Abbildung 4.6** Auflösung des ersten Peaks bei ca. 0,1 V aus Abbildung 4.5a. Zum Vergleich ist zusätzlich das Ergebnis einer Rechnung mit Methode G2 gezeigt. Als gestrichelte Linie ist die gemittelte Teilchendichte  $\bar{n}$  innerhalb des Quantentopfes dargestellt.

Resultaten, die im Mittel etwas näher an der QTBM-Lösung liegen. In beiden Fällen bilden sich jedoch statt einem Peak drei Peaks aus, die lediglich in der Höhe variieren. Möglicherweise ist auch dieses Problem auf die  $y$ -Diskretisierung zurück zu führen (siehe oben). Andererseits deutet der Verlauf der mittleren Dichte

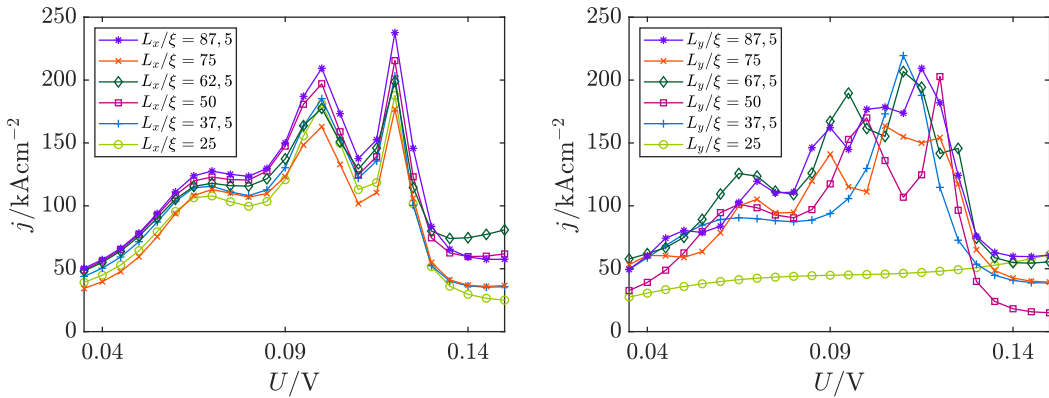
$$\bar{n} \equiv \frac{1}{L_D} \int_{-L_D/2}^{+L_D/2} dx n(x, t \rightarrow \infty)$$

innerhalb des Quantentopfes (siehe Abbildung 4.6) darauf hin, dass diese Begründung unzulänglich ist. Es ist nämlich zu erwarten, dass diese Größe dieselben resonanten Peaks zeigt, denn die Besetzung innerhalb des Quantentopfes ist ein Maß für die Zahl resonant besetzter Zustände [13]. Ein weiterer wichtiger Parameter könnte in

## 4 Ergebnisse

diesem Zusammenhang  $L_y$  sein, welcher ein Maß für die Ausdehnung ist, über die Quantenkorrelationen berücksichtigt werden.

Als nächstes werden daher die Parameter  $L_x$  und  $L_y$  variiert. Dabei zeigt sich sogar, dass die Ergebnisse mit Methode G1 teilweise zu negativen Stromflüssen führen. Dies ist ein klarer Indikator für die Problematik, die mit einer vergleichsweise groben Näherung des Driftterms einhergeht. Daher wird im Folgenden stets mit Methode G2 gerechnet (was einen rechnerischen Mehraufwand um einen Faktor neun in etwa mit sich bringt). Abbildung 4.7 zeigt das Resultat der Parametervariation im Bereich des ersten Peaks. Offenbar haben beide Parameter einen Einfluss auf die Höhe des



**Abbildung 4.7** Parametervariation bezüglich  $L_x$  (links) und  $L_y$  (rechts). Parameter der Numerik:  $K_x = 60$ ,  $N = 2$ . Links ist  $K_y = 180$  zudem konstant. Die Ausdehnung des CAP wird mit  $\delta/\xi = 8,3$  fixiert. Für die rechte Abbildung wird der Gitterabstand  $h_y = L_y/K_y$  konstant gehalten, sodass keine Verzerrung bezüglich der Diskretisierung stattfindet.

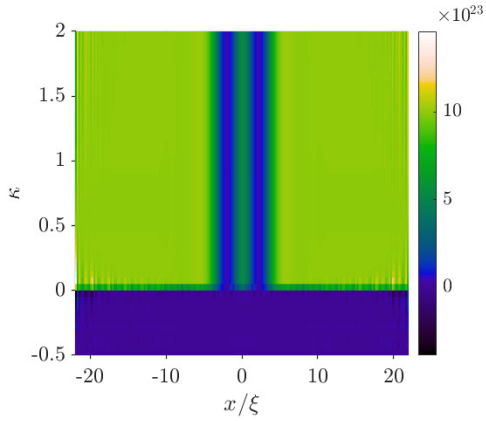
Peaks. Zusätzlich schwanken jedoch mit  $L_y$  sowohl Position als auch Anzahl der Peaks. Genauer gesagt wird für  $L_y/\xi = 37,5$  lediglich ein Peak aufgelöst und mit steigendem  $L_y$  kommen immer weitere Peaks hinzu, deren Amplituden zunehmend schwächer ausgeprägt sind. Dieses Verhalten deutet darauf hin, dass im Grenzfall großer Ausdehnung tatsächlich nur noch ein Peak verbleibt.

Zusammenfassend bleibt festzuhalten, dass das Verfahren sehr sensibel auf den gewählten Parametersatz reagiert. Prinzipiell sind die Ergebnisse für die Strom-Spannungs-Kennlinie akzeptabel, jedoch stellt insbesondere die Auflösung des ersten Peaks ein Problem dar. Die Herkunft der zusätzlichen Peaks kann nicht abschließend geklärt werden, allerdings tritt dieses Problem auch in anderen Verfahren, z.B. in der Veröffentlichung [26] auf. Einen großen Einfluss wird hierbei auch das CAP haben, was möglicherweise in weiteren Arbeiten untersucht werden kann.

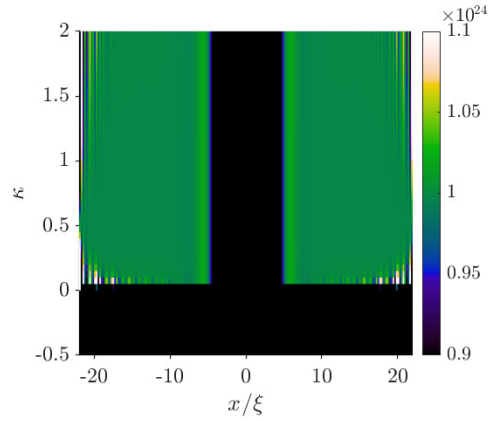


### 4.3.3 Einfluss des Strafparameters

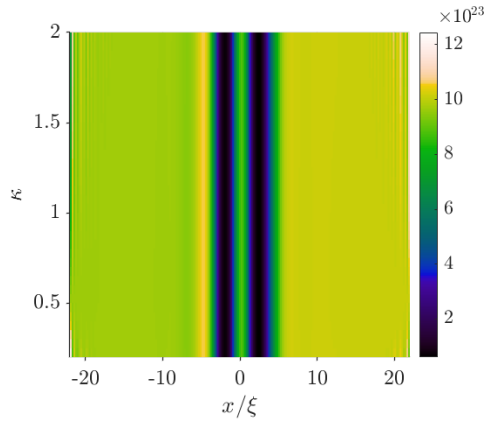
Neben den beiden für die Feinheit der Diskretisierung verantwortlichen Parametern  $K_x$  und  $N$  bietet das entwickelte DG-Verfahren die Wahl des Strafparameters  $\kappa$ , siehe Gleichung (3.24). Aufgrund der Transport-Charakteristik der LNG ist zu erwarten, dass ein Upwind-Fluss die beste Approximation an den echten Fluss darstellt. Diese Erwartung wird anhand der Abbildung 4.8 bestätigt. Es zeigt sich, dass es sowohl



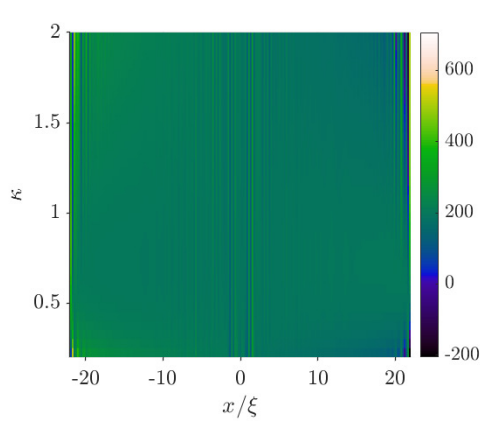
(a)  $n(x, \kappa)$  in  $\text{m}^{-3}$  bei  $U_1 = 0 \text{ V}$ .



(b) Auflösung der Oszillationen.



(c)  $n(x, \kappa)$  in  $\text{m}^{-3}$  bei  $U_2 = 0,1 \text{ V}$  und akzeptablen Werten für  $\kappa$ .



(d)  $j(x, \kappa)$  in  $\text{kAcm}^{-2}$  bei  $U_2 = 0,1 \text{ V}$  und akzeptablen Werten für  $\kappa$ .

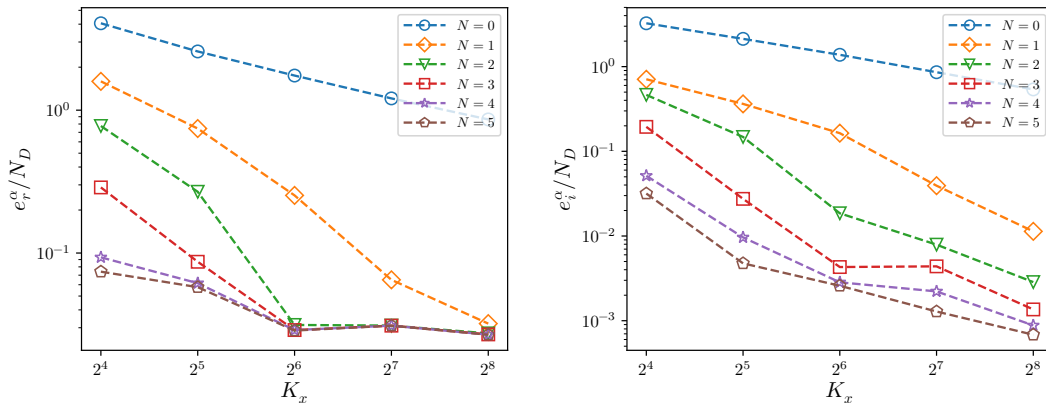
**Abbildung 4.8** Variation des Strafparameters  $\kappa$ .

für  $j(x)$ , als auch für  $n(x)$  im Bereich eines zentralen Flusses  $\kappa = 0$  zu starken Oszillationen kommt. Für negatives  $\kappa$  bricht das Verfahren vollständig zusammen, wie dies auch durch die Existenz-Analyse aus Kapitel 3.3.3 vorausgesagt wird.

Genauere Betrachtungen für  $\kappa > 0$  zeigen die beiden rechten Teile der Abbildung. Es ist klar zu erkennen, dass es insbesondere am Randbereich  $x \approx \pm L_x/2$  zu Oszillationen kommt, wenn  $\kappa \neq 1/2$ .

## 4.4 Konvergenzordnung der stationären Lösung

Für eine quantitative Analyse wird ein Vergleich des DG-Verfahrens mit der TM gezogen. Die Lösung der TM wird als analytische Lösung gesetzt und der Fehler nach Gleichung (4.1) berechnet. Das Resultat ist in Abbildung 4.9 zu sehen. Es zeigt



**Abbildung 4.9** Analytischer Fehler  $e_{r/i}$  mit der Lösung aus der TM als exakte Lösung.

sich eine sehr schwache Konvergenz, wobei nicht sichergestellt ist, ob es überhaupt zu einer Konvergenz im wörtlichen Sinne kommt. Vielmehr scheint es bezüglich des Realteils eine Art konstante Differenz zu geben. Die zugehörigen Fehlerraten sind

$$r_r = \{0.58 \pm 0.05, 1.54 \pm 0.35, 1.55 \pm 1.26, 1.07 \pm 0.83, 0.53 \pm 0.49, 0.42 \pm 0.46\}$$

$$r_i = \{0.64 \pm 0.03, 1.39 \pm 0.48, 1.96 \pm 0.75, 1.82 \pm 1.31, 1.51 \pm 0.86, 1.54 \pm 0.85\}$$

$$r_{\mathcal{T},r} = \{0.36 \pm 0.13, 1.14 \pm 0.75, 1.41 \pm 1.21, 1.66 \pm 0.49, 1.47 \pm 0.83, 1.45 \pm 0.8\}$$

und damit weit entfernt von der optimalen Konvergenz (4.4). Es ist noch anzumerken, dass die Raten für Methode G1 noch schlechter sind. Die Suche nach möglichen Erklärungen führt unter Anderem auf die Frage nach der Form des Potentials. Im Wigner-Formalismus muss das Potential gefaltet werden und es bereitet dort wegen

des Gibbschen Phänomens Schwierigkeiten, dieses nicht-lokale Faltungsintegral für eine Rechteckfunktion auszuwerten. Ein möglicher Ansatz zur Umgehung des Problems ist dann die Glättung des Potentials, wie beispielsweise in [1] geschehen.

Dieser Idee wird nachgegangen, indem das Potential  $V^s$  mit einer Gauß-Funktion gefaltet und damit geglättet wird (der entsprechende Parameter ist in Tabelle 4.1 mit doPotConv gekennzeichnet). Das Ergebnis für die iterativen Fehler<sup>2</sup> ist in Abbildung 4.10 gezeigt. Die zugehörigen Fehlerraten sind

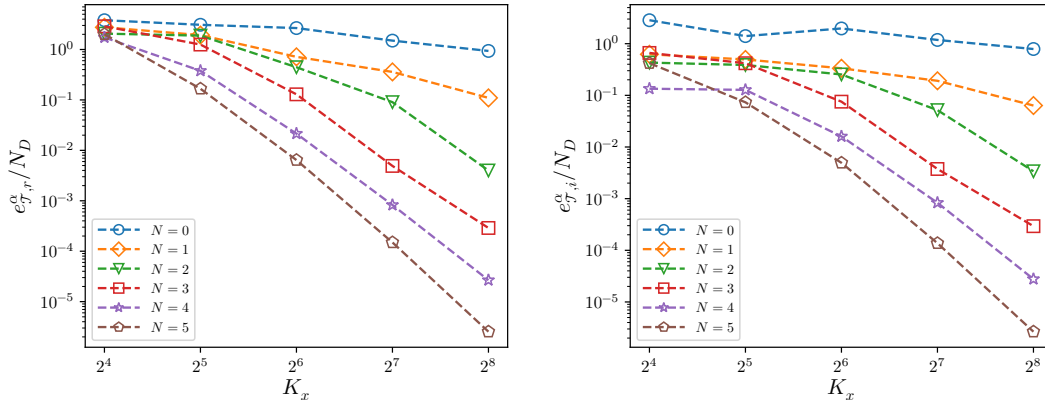


Abbildung 4.10 Iterativer Fehler für die LNG mit geglättetem Potential.

$$r_{T,r} = \{0.45 \pm 0.27, 0.98 \pm 0.38, 1.5 \pm 0.98, 3.07 \pm 1.44, 3.68 \pm 1.07, 4.57 \pm 0.75\}$$

$$r_{T,i} = \{0.42 \pm 0.66, 0.57 \pm 0.19, 1.02 \pm 0.92, 2.49 \pm 1.5, 2.44 \pm 1.76, 3.86 \pm 1.08\}.$$

Ab einer Systemgröße von etwa  $K_x N \approx 160$  wird darüber hinaus nahezu optimale Konvergenz erreicht, wie die Abbildung bereits vermuten lässt.

<sup>2</sup>Die TM-Methode geht von einem Flachbandpotential aus und ist daher nun nicht mehr verfügbar.

## 4.5 Transiente Lösung

In diesem Abschnitt wird die Antwort des Systems auf die zwei zeitlich variierenden Eingangsspannungen

$$U_1(t) = \begin{cases} U_A & t \leq 0 \\ (U_B - U_A) \frac{t}{t_{\text{ramp}}} & 0 < t < t_{\text{ramp}} \\ U_B & t > t_{\text{ramp}} \end{cases}$$

$$U_2(t) = U_C \sin(2\pi ft)$$

untersucht. Dabei werden die Konstanten zu

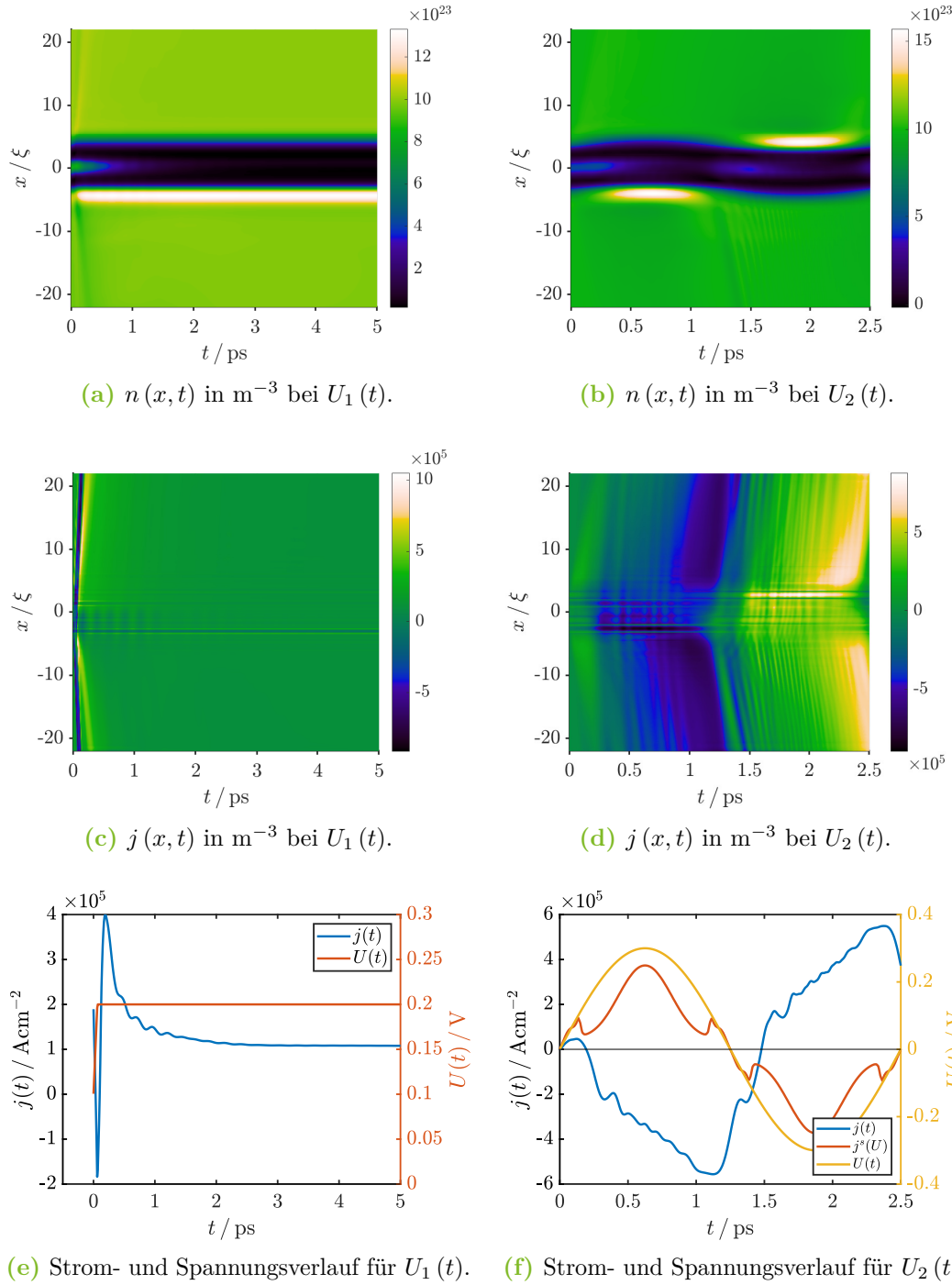
$$\begin{array}{lll} U_A = 0,1 \text{ V} & U_B = 0,2 \text{ V} & U_C = 0,3 \text{ V} \\ t_{\text{ramp}}/\tau = 6 & f \cdot \tau = 0,013 & (\text{entspricht } 400 \text{ GHz}) \end{array}$$

gewählt. Für den ersten Fall ergibt sich mit  $t_{\text{ramp}} \rightarrow 0$  die Frage nach der *Sprungantwort* des Systems. In allen transienten Berechnungen wird die stationäre Lösung zu der Spannung  $U(t=0)$  als Anfangsbedingung gesetzt.

Die Ergebnisse für Strom und Spannung sind in Abbildung 4.11 zusammengestellt. Dabei ist das RK2-Verfahren mit dem nach Formel (3.42) errechneten Zeitschritt  $\Delta t/\tau = 0,1036$  (entspricht 0,3252 fs) zum Einsatz gekommen. Die Konstante  $c$  in dieser Gleichung ist numerisch getestet worden. Es zeigt sich, dass es ab  $c = 1$  zu Instabilität kommt. Mit dahingegen restriktiv gewähltem  $c = 0,2$  hingegen treten keine Probleme auf.

Für das RK2-Schema ist zu Testzwecken (wie in Kapitel 3.3.5.1 erwähnt) ein gewisser Mehraufwand hinsichtlich *Limiter* und *strong stability preserving* implementiert worden. Die Verwendung eines RK4-Schemas liefert keine Abweichungen gegenüber dem RK2-Schema. Es kommt daher erwartungsgemäß zu keinen Problemen bezüglich Überschwingern in Folge nicht-stetiger Eingangsdaten.

Die Abbildung 4.11 zeigt, dass das System bei einem Sprung der Spannung von 0,1 V auf 0,2 V nach einigen Überschwingern nach etwa 2 ps auf den neuen stationären Zustand eingeschwungen ist. Es ist daher zu erwarten, dass die eingestellte Frequenz von 400 GHz zu hoch ist, als dass das System mit dem stationären Stromfluss  $j^s(U)$  aus Abbildung 4.5a folgen könnte. Diese Erwartung bestätigt sich im rechten Teil der Abbildung. Es ist zu beobachten, dass der Strom bei positiver Spannung sogar negativ wird. Der Strom scheint der Spannung phasenverschoben zu folgen.



**Abbildung 4.11** Zeitlicher Verlauf der Observablen. In den untersten Abbildungen ist zusätzlich zum gemessenen Strom der zu  $U(t)$  korrespondierende stationäre Strom  $j^s(U)$  eingezeichnet. Parameter der Numerik:  $K_x = 33$ ,  $N = 2$ ,  $K_y = 100$ .

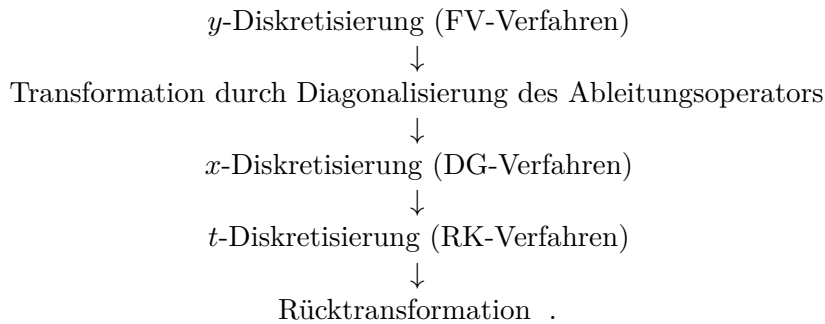
Hierzu ist anzumerken, dass die numerischen Parameter mit einer Systemgröße  $K_x N = 66$ ,  $K_y = 100$  eine relativ grobe Diskretisierung darstellen. Die aus der Ortsdiskretisierung resultierenden Fehler werden durch die Zeitentwicklung weiter verstärkt, sodass es zwangsläufig zu einem Abweichen von der stationären Lösungen kommen muss für nicht-konstante Spannungen. Der Grund für die grob gewählte Diskretisierung wiederum ist schlicht in dem Rechenaufwand zu finden. Für eine zeitabhängige Spannung muss in jedem Zeitschritt die hoch-besetzte Matrix  $\mathcal{G}$  (vergleiche Abbildung 3.6a) neu berechnet werden. Auch ein Zwischenspeichern und späteres Abrufen für bereits berechnete Spannungswerte ist nicht hilfreich aufgrund der immensen Datengröße. Mit einigem Aufwand könnte an dieser Stelle weiter optimiert werden.

## 5 Zusammenfassung

Das Ziel der vorliegenden Arbeit ist die Entwicklung sowie das Testen eines neuen numerischen Schemas für die LNG – der Bewegungsgleichung für den reduzierten Dichteoperator. Dabei ist der Fokus auf der Ortsraumformulierung verblieben, da mit diesem Ansatz insbesondere die Hoffnung verbunden ist, schnellere Konvergenz für den in der LNG enthaltenen Driftoperator zu erzielen. Außerdem verspricht das DG-Verfahren Vorteile bezüglich der Flexibilität in der Wahl des Gitters bzw. im zweidimensionalen in der Wahl der Triangulierung sowie der Wahl eines numerischen Flusses.

Ein solches DG-Verfahren ist für ein kohärentes Modell einer RTD in dieser Arbeit entwickelt worden. Für die vollständige Orts-Diskretisierung ist ein Hybridverfahren FV/DG gewählt worden, wodurch der Vorteil einer flexiblen, zweidimensionalen Triangulierung nicht weiter gegeben ist. Stattdessen muss wegen der Tensorstruktur der Basisfunktionen der numerischen Approximation auf ein rechteckiges Gitter zurückgegriffen werden.

Das Hybridverfahren wird dennoch ausgewählt, da es im Zusammenhang mit den Randbedingungen vielversprechend ist. Erst durch die Diagonalisierung des Ableitungsoperators  $i\partial_y$  bezüglich der Relativkoordinate  $y$  lassen sich die Inflow-Randbedingungen setzen, für welche die Teilchen anhand ihrer Geschwindigkeit unterscheidbar sein müssen. Diese Diagonalisierung entspricht letztlich dem Übergang in den Phasenraum, denn die Eigenfunktionen des Ableitungsoperators sind ebene Wellen. Eine solche Diagonalisierung ist in einem zweistufigen Diskretisierungs-Verfahren deutlich leichter durchführbar. Damit ähnelt das Vorgehen dem Wigner-Formalismus. Jedoch findet die Transformation in dem hier vorgestellten Verfahren erst nach der Diskretisierung bezüglich  $y$  statt. Schematisch ist das Vorgehen:



Die nach der Diagonalisierung resultierende Differentialgleichung ist ein System von gekoppelten Advektions-Reaktions-Gleichungen. Für dieses System ist in Kapitel 3.3 eine variationale Formulierung hergeleitet worden. Ein essentieller Bestandteil

ist der numerische Fluss, welcher unter Berücksichtigung der Theorie hyperbolischer Differentialgleichungen optimalerweise zu einem Upwind-Fluss bestimmt worden ist. Das entwickelte Schema ist konsistent, das heißt es gilt in dieser approximativen Form auch für die exakte Lösung der PDG. In der Einleitung ist zur Motivation unter Anderem die Flexibilität in der Wahl des numerischen Flusses genannt worden. Die Simulationen in Abschnitt 4.3.3 weisen jedoch darauf hin, dass einzig der Strafparameter  $\kappa = 0,5$  und daher ein Upwind-Fluss sinnvoll ist. Die einzig weitere Freiheit unter Beibehaltung der Konsistenz besteht in der Addition von Sprüngen. Es könnten versuchsweise in einer weiterführenden Arbeit auch Sprünge der in  $y$ -Richtung benachbarten Zellen mit einbezogen werden.

Die Frage nach der Wohlgestelltheit des Variationsproblems kann nicht zufriedenstellend beantwortet werden, da die Volumenanteile in der Abschätzung für die Koerzivität nach unten nur durch Null abgeschätzt werden können. Ähnliche Arbeiten [41] gehen an dieser Stelle von positiver Definitheit des Reaktionsterms aus. Dies ist im Falle der LNG jedoch nicht gegeben. Darüber hinaus ist die Stabilität bezüglich des transienten Verhaltens lediglich *a posteriori* in Abschnitt 4.5 bestätigt worden, denn die dazu nötige Annahme lässt sich nicht allgemein zeigen. In einer ähnlichen Arbeit [38] liegt der entscheidende Unterschied in der Annahme von periodischen Randbedingungen.

Die numerischen Experimente zur Implementierung des Hybridverfahrens gliedern sich durch die Variation verschiedener Parameter. Zur physikalischen Interpretation werden Teilchendichte und -strom gemäß den theoretischen Vorüberlegungen aus der numerischen Lösung errechnet. Zusätzlich werden Fehlerraten definiert, anhand derer die Qualität des Verfahrens abzulesen ist. Dabei ergibt sich zunächst eine grobe Übereinstimmung mit numerischen Referenzverfahren wie der QTBM sowie der TM. Bei näherer Betrachtung ist jedoch insbesondere das Verhalten des Stromes am ersten zu erwartenden Resonanzpeak der Strom-Spannungskennlinie problematisch. Es bilden sich entgegen der Erwartung mehrere Peaks aus. Die Ursache hierfür kann nicht abschließend geklärt werden, jedoch hat vor Allem die Ausdehnung des Rechengebietes bezüglich der Relativkoordinate einen starken Einfluss auf die Kennlinie. Dies wiederum entspricht der anschaulichen Erwartung in Anbetracht der Randbedingungen, die von einem rückkopplungsfreien Bauteil ausgehen. Eine solche Annahme ist erst in ausreichend großer Entfernung der Reservoirs vom Bauelement plausibel. Außerdem ist zu erwarten, dass Quantenkorrelationen erst mit großen relativen Abständen der Teilchen abnehmen. Tatsächlich scheint diese Anschauung durch das Schema bestätigt zu werden: Mit zunehmender Länge  $L_y$  bei in gleichem Maße zunehmender Anzahl Zellen  $K_y$  bilden sich immer weitere Peaks aus, deren Amplitude abnimmt. Dieses Verhalten mündet also im Grenzfall in einem einzigen resonanten Peak. An dieser Stelle ist ein alternatives Verfahren für die  $y$ -Diskretisierung erwägenswert. So könnte beispielsweise mit einem CG-



---

Verfahren ein genauerer Ausdruck für den Strom gefunden werden, da hierfür eine Ableitung benötigt wird, siehe Gleichung (4.5). Alternativ soll an dieser Stelle ein FV/FV-Verfahren mit höherem Polynomgrad vorgeschlagen werden, da auch die FV-Verfahren für die Lösung von Erhaltungsgleichungen ausgelegt sind und ebenso die Implementierung eines Flusses erfordern.

Bei der Analyse der Fehlerraten wird festgestellt, dass die Problematik eines rechteckigen Potentialverlaufs bei der Berechnung der nicht-lokalen Faltungsintegrale im Wigner-Formalismus sich auch in der LNG im Ortsraum niederschlägt. Hier stellt sich die Frage, wie gut eine solche Rechteckfunktion durch die Basispolynome genähert werden kann. Erst die Glättung des Potentials führt zu akzeptablen Fehlerraten nahe der optimalen Ordnung  $h_x^{N+1}$ .

Die Simulationen zur transienten Lösung aus Abschnitt 4.5 belegen die Stabilität des Verfahrens. Unklar ist hingegen, wie korrekt die Vorhersagen für den Strom im Falle eines schnellen, zeitabhängigen Eingangssignals wie zum Beispiel einer Wechselspannung mit einer Frequenz von 400 GHz sind. Langsamere Eingangssignale könnten zwar voraussichtlich berechnet werden, jedoch sind die Zeitschritte mit  $\Delta t \approx 1$  fs beschränkt. Dennoch stellt die Möglichkeit zur transienten Rechnung einen großen Vorteil des gesamten Verfahrens insbesondere gegenüber der sehr viel allgemeineren Formulierung mit Hilfe von Greens-Funktionen (NEGF-Formalismus) dar.

Insgesamt hat die Arbeit gezeigt, dass die Implementierung eines DG-Verfahrens für die LNG zwar möglich ist, jedoch die erhofften Vorteile insbesondere aufgrund der Inflow-Randbedingungen sich nicht als solche umsetzen lassen.

## A Anhang

### A.1 Ortsbasis

Für ein einzelnes Teilchen wird mit  $\{|x\rangle\}$  die Menge der Eigenvektoren des Orstope-  
rators

$$X : D_X \rightarrow L^2(\mathbb{R}^3; \mathbb{C}) : \Psi \mapsto x\Psi$$

zu den (i.A. komplexen) Eigenwerten  $x$  bezeichnet. Hierbei ist  $D_X$  die Domäne

$$D_X = \{\Psi \in L^2(\mathbb{R}^3) \mid x\Psi \in L^2(\mathbb{R}^3)\}$$

des selbstadjungierten Operators  $X$ . Mit anderen Worten ist für eine Teilchenzahl  $N$  der Zustand  $|x\rangle$  derjenige Zustand, für den der Aufenthaltsort jedes Teilchens exakt bekannt (mit  $x$  zusammengefasst) und wegen der Unschärferelation der Impuls vollständig unbekannt ist. die  $|x\rangle$  stellen als Kontinuum eine uneigentliche Basis dar. Für die Spurbildung ist folglich ein Integral über  $D_X$  auszuführen, statt einer Summation.

### A.2 Integration der Fermi-Dirac-Statistik

Im Folgenden wird die Teilchendichte (Teilchenzahl pro Fläche) für bezüglich  $x$ - und  $y$ - Richtung freie Elektronen im großkanonischen Ensemble mit chemischem Potential  $\mu$  hergeleitet. Dabei ist die Fermi-Dirac-Statistik gemäß Gleichung (2.25) über alle möglichen Impulse  $\mathbf{k} = (k_x, k_y, k_z)$  zu integrieren. Allerdings ist die Dispersionsrelation bzgl.  $k_z$  nicht bekannt, weshalb diese Variable zunächst als Freiheitsgrad beibehalten wird.

$$\begin{aligned} \frac{\langle N \rangle}{A_\perp} &= 2 \frac{1}{A_\perp} \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{1 + \exp(\beta(\epsilon(\mathbf{k}) - \mu))} \\ &= 2 \frac{1}{A_\perp} \frac{A_\perp}{(2\pi)^2} \sum_{k_z} \int_{-\infty}^{\infty} dk_y \int_{-\infty}^{\infty} dk_x \frac{1}{1 + \exp\left(\beta\left(k_x^2 + k_y^2 + k_z^2\right) \frac{\hbar^2}{2m} - \mu\right)} \\ &= \frac{2}{(2\pi)^2} \sum_{k_z} \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{\infty} dk_\perp k_\perp \frac{1}{1 + \exp\left(\beta\left(k_\perp^2 + k_z^2\right) \frac{\hbar^2}{2m} - \beta\mu\right)} \end{aligned}$$

Substitution von  $\epsilon = \left(k_{\perp}^2 + k_z^2\right) \frac{\hbar^2}{2m} - \mu$  und somit  $dk_{\perp} = \frac{m}{\hbar^2 k} d\epsilon$  sowie der Zusammenhang  $\frac{d}{dx} \ln(1 + \exp(-\beta x)) = -\beta / (1 + \exp(\beta x))$  liefern

$$\begin{aligned} \frac{\langle N \rangle}{A_{\perp}} &= \frac{4\pi}{(2\pi)^2} \frac{m}{\hbar^2} \sum_{k_z} \int_{\epsilon(0)}^{\epsilon(\infty)} d\epsilon \frac{1}{1 + \exp(\beta \epsilon)} \\ &= \frac{m}{\pi \hbar^2} \left( \frac{-1}{\beta} \right) \sum_{k_z} \ln \left( 1 + \exp \left( -\beta \left( k_{\perp}^2 + k_z^2 \right) \frac{\hbar^2}{2m} + \beta \mu \right) \right) \Bigg|_0^{\infty} \\ &= \sum_{k_z} \frac{m}{\pi \hbar^2 \beta} \ln \left( 1 + \exp \left( \beta \left( \frac{-k_z^2 \hbar^2}{2m} + \mu \right) \right) \right) \end{aligned}$$

Für lokal konstantes  $\beta$  folgt daher in Übereinstimmung mit [3] die Beschreibung der Reservoirs gemäß

$$f_{l,r}(k) = \frac{m}{\pi \hbar^2 \beta} \ln \left( 1 + \exp \left( \beta \left( \frac{-k^2 \hbar^2}{2m} + \mu_{l,r} \right) \right) \right). \quad (\text{A.1})$$

### A.3 Chemisches Potential

Das chemische Potential der Kontakte ergibt sich aus der Forderung nach Ladungsneutralität unter Kenntnis der Dotierung von Donatoren  $N_D$  und Akzeptoren  $N_A$ . Für  $n$ -dotiertes GaAs gilt demnach

$$0 = N_D - p + N_A - n \approx N_D - n(\mu) \equiv f(\mu)$$

Die Elektronendichte folgt aus Zustandsdichte und Fermi-Dirac-Verteilung gemäß

$$\begin{aligned} n(\mu) &= \int dE \rho(E) f(E) \\ &= \int_{E_c}^{\infty} \frac{(2m)^{3/2}}{2\pi^2 \hbar^3} \sqrt{E - E_c} \frac{1}{1 + e^{\beta(E - E_c - \mu)}} \end{aligned}$$

Die Leitungsbandkantenenergie  $E_c$  der GaAs-Schicht wird zu 0 gewählt. Das chemische Potential wird aus der Nullstellensuche  $f(\mu) = 0$  mit einem Newton-Raphson-Verfahren ermittelt. Numerisch ergibt sich für den Gleichgewichtsfall  $\mu \approx 0,04617 \text{ eV}$ .

## A.4 Hartree-Potential

Das Hartree-Potential ist mit der Elektronendichte  $n(\mathbf{x})$  durch die *Poisson-Gleichung* [2]

$$-\nabla \cdot \epsilon(\mathbf{x}) \nabla u(\mathbf{x}) = e^2 (n(\mathbf{x}) - N_D(\mathbf{x})) , \quad (\text{A.2})$$

verknüpft, wobei  $N_D(\mathbf{x})$  die ortsabhängige Dichte der Donatoren in der Heterostuktur und  $\epsilon(\mathbf{x})$  die Permittivität bezeichnet. Akzeptoren und Löcher werden aufgrund der Dotierung  $N_D \gg N_A$  vernachlässigt. Ferner ist aufgrund der eindimensionalen Problemstellung anzunehmen, dass  $u(\mathbf{x}) = u(x)$  und  $\epsilon(\mathbf{x}) = \epsilon(x)$  sodass die Poisson-Gleichung eindimensional wird.

$$-\partial_x (\epsilon(x) \partial_x u(x)) = e^2 (n(x) - N_D(x)) \quad (\text{A.3})$$

Die Randbedingungen für  $u$  ergeben sich aus der Forderung nach Ladungsneutralität in ausreichend großer Entfernung gemäß [2]

$$u|_{\partial\Omega} = \mu(\mathbf{x})|_{\partial\Omega} - V_s(\mathbf{x})|_{\partial\Omega} - \frac{1}{\beta} \mathcal{F}_{1/2}^{-1}(N_D/N_C) . \quad (\text{A.4})$$

Hierin ist  $\mu(\mathbf{x})$  das chemische Potential,  $\beta = 1/(k_B T)$  mit  $T = 300 \text{ K}$ ,  $N_C = 2 \left( m^*/2\pi\hbar^2\beta \right)^{3/2}$  die effektive Zustandsdichte und  $\mathcal{F}_{1/2}$  das Fermi-Dirac Integral der Ordnung  $1/2$ :

$$\mathcal{F}_j(x) = \frac{1}{\Gamma(j+1)} \int_0^\infty \frac{t^j}{\exp(t-x)+1} dt \quad (\text{A.5})$$

Das Potential ergibt sich nach Gleichungen (A.3) und (2.7) aus dem Dichteoperator – umgekehrt ergibt sich der Dichteoperator nach Gleichung (2.20) aus dem Potential. Die Beziehung zwischen Potential und Dichte ist nicht-linear. Die gleichzeitige Lösung für Poisson-Gleichung und LNG zu finden erfordert daher Iteration. Das Problem wird *selbstkonsistent* gelöst. Dazu wird (2.20) zunächst mit einem geeigneten *initial guess*  $V^{(0)}$  gelöst. Nun wird iteriert und alternierend gelöst, bis Dichte und Potential sich nicht mehr signifikant ändern. Im Fall der transienten Betrachtung entspricht eine Iteration gleichzeitig einem Zeitschritt. Das Verfahren ist als *Gummel (Plug-in) Approach* etabliert und beispielsweise in [43] beschrieben. Die folgenden Ausführungen orientieren sich an dieser Literaturquelle.

Numerisch kann Gleichung (A.3) mit dem Finite-Differenzen Verfahren behandelt werden. Das Rechengebiet  $L$  wird diskretisiert gemäß

$$L_N \equiv \{x_i | x_i = ih \forall i = 0, 1, \dots, N \text{ mit } L = Nh\}$$

Aus der Taylorentwicklung einer Funktion  $f : L \rightarrow \mathbb{R}$  folgt für die Ableitungen

$$\begin{aligned} f'(x_i) &= \frac{f(x_{i+1}) - f(x_{i-1}))}{2h} + \mathcal{O}(h^2) \\ f''(x_i) &= \frac{f(x_{i+1}) - 2f(x_i) + f(x_{i-1}))}{h^2} + \mathcal{O}(h^2) . \end{aligned}$$

Die Kurzschreibweise  $f(x_i) \equiv f_i$  bietet sich an. Damit lässt sich mit  $a_i \equiv (\epsilon_{i+1} - \epsilon_{i-1}) / (4\epsilon_i)$  Gleichung (A.3) umschreiben zu

$$u_{i+1} \cdot (1 + a_i) - 2u_i + u_{i-1} \cdot (1 - a_i) - \underbrace{e^2 h^2 \frac{(N_{D,i} - n_i)}{\epsilon_i}}_{\equiv \text{rhs}_i} = 0 , \quad (\text{A.6})$$

wobei berücksichtigt werden muss, dass  $u_0$  und  $u_N$  über die Randbedingungen nach Gleichung (A.4) vorgegeben sind. Somit ist das LGS

$$\begin{bmatrix} -2 & 1 + a_1 & & & 0 \\ 1 - a_2 & \ddots & \ddots & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & \ddots & \ddots & 1 + a_{N-2} \\ 0 & & & 1 - a_{N-1} & -2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u_1 \\ \vdots \\ u_{N-1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \text{rhs}_1 \\ \vdots \\ \text{rhs}_{N-1} \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} (1 - a_1) u_0 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \\ (1 + a_{N-1}) u_N \end{bmatrix}$$

zu lösen. Die Frage nach einer „besseren“ Vorhersage für  $u^{(n+1)}$  und damit einer schnelleren Konvergenz der Iteration führt auf das verallgemeinerte Newton-Raphson-Verfahren. Die linke Seite von Gleichung (A.6) wird als Funktion  $P_i(u_1, \dots, u_N)$  definiert, worauf das Newton-Raphson-Verfahren angewandt wird. Ausgehend von einem Startwert  $\mathbf{u}^{(0)}$  ergibt sich das Fixpunktproblem

$$\mathbf{u}^{(n+1)} = \mathbf{u}^{(n)} - (\text{DP}|_{\mathbf{u}^{(n)}})^{-1} \mathbf{P}(\mathbf{u}^{(n)}) , \quad (\text{A.7})$$

wobei die Vektorschreibweise

$$\mathbf{f} = (f_0, \dots, f_N)^T = (f(x_0), \dots, f(x_N))^T$$

eingeführt worden ist und D der Differentiationsoperator ist, in diesem Fall also die Jacobimatrix von  $P$ .

$$\begin{aligned} (\text{DP}|_{\mathbf{u}^{(n)}})_{i,j} &= \frac{\partial P_i}{\partial u_j^{(n)}} \\ &\stackrel{(\text{A.6})}{=} (1 + a_i) \delta_{i+1,j} - 2\delta_{i,j} + (1 - a_i) \delta_{i-1,j} + \frac{e^2 h^2}{\epsilon_i} \frac{\partial n_i^{(n)}}{\partial u_j^{(n)}} \end{aligned}$$

An dieser Stelle ist anzumerken, dass nun auch die Dichte  $n$  einen Iterationsindex  $(n)$  bekommen hat. Dies ist auf die eingangs beschriebene alternierende Iteration zurückzuführen, in welcher abwechselnd  $n^{(n)}$  und  $u^{(n)}$  in einem einzigen Iterationsschritt  $(n)$  berechnet werden. Ferner ist die Ableitung  $\frac{\partial n_i^{(n)}}{\partial u_j^{(n)}}$  zunächst nicht

bekannt. Es ist überhaupt eine Abweichung  $\frac{\partial n_i^{(n)}}{\partial u_j^{(n)}} \neq 0$ , die den Unterschied zwischen Newton-Iteration und direktem Lösen bewirkt. Im Allgemeinen liegt keine exakte Form dieser Ableitung vor, da hierzu ja gerade die LNG zu lösen ist. Es lässt sich jedoch eine Abschätzung vornehmen, welche schnell und kostengünstig ist, sodass das Newton-Verfahren einen echten Vorteil gegenüber dem direkten Iterieren hat. Dazu dient die Maxwell-Boltzmann-Statistik

$$n(u) = N_0 \exp\left(\frac{u - u_0}{k_B T}\right) \quad (\text{A.8})$$

als klassisches Gleichgewichts-Resultat. Dies ist wohlgermerkt eine Annahme und es lassen sich ebenso andere Annahmen, z.B. eine Fermi-Dirac-Statistik, wählen. Jedoch zeigt sich in der Praxis, dass diese Wahl zuverlässig zu einer Konvergenz des Verfahrens führt. Falls nicht stationär, sondern transient gelöst werden soll, sollte jedoch das Newton-Verfahren nicht verwendet werden, da ein Iterationsschritt hier einem Zeitschritt entspricht und die Annahme (A.8) heuristischer Natur ist. Somit würde physikalisches Verhalten implizit aufgeprägt werden, statt dass dieses durch die vorhandenen zwei Gleichungen beschrieben wird.

Für den stationären Fall folgt aus Annahme (A.8) für das diskretisierte System

$$\frac{\partial n_i}{\partial u_j} = \frac{n_i}{k_B T} \delta_{i,j} .$$

Statt die Jacobi-Matrix invertieren zu müssen, ist es geschickter, Gleichung (A.7) umzuschreiben:

$$\mathbf{DP}|_{\mathbf{u}^{(n)}} \left( \mathbf{u}^{(n+1)} - \mathbf{u}^{(n)} \right) = -\mathbf{P} \left( \mathbf{u}^{(n)} \right)$$

Explizit ausgeschrieben gilt

$$\begin{aligned} (\mathbf{DP}|_{\mathbf{u}^{(n)}})_{i,j} &= (1 + a_i) \delta_{i+1,j} + \left( \frac{e^2 h^2}{\epsilon_i} \frac{n_i}{k_B T} - 2 \right) \delta_{i,j} + (1 - a_i) \delta_{i-1,j} \\ \left( \mathbf{P} \left( \mathbf{u}^{(n)} \right) \right)_i &= u_{i+1}^{(n)} \cdot (1 + a_i) - 2u_i^{(n)} + u_{i-1}^{(n)} \cdot (1 - a_i) - e^2 h^2 \frac{\left( N_{D,i} - n_i^{(n)} \right)}{\epsilon_i} \end{aligned}$$

mit  $i, j = 1, \dots, N - 1$ . Lösen des LGS für  $\left( \mathbf{u}^{(n+1)} - \mathbf{u}^{(n)} \right)$  führt zu

$$\mathbf{u}^{(n+1)} = \left( \mathbf{u}^{(n+1)} - \mathbf{u}^{(n)} \right) + \mathbf{u}^{(n)} .$$

## A.5 Herleitung der Driftmatrix

Im Folgenden soll der Ausdruck (3.36) ausgehend von der Definition 3.3.2 der Driftmatrix

$$\left(\mathcal{G}^{k,jm}\right)_{pq} = \int_{D^k} G_{jm}(x) \ell_p^k(x) \ell_q^k(x) dx \quad \forall j, m = 1 \dots K_y$$

hergeleitet werden. Dazu wird zunächst Gleichung (3.35) angewandt, also

$$\ell_i(x) = \sum_{n=1}^{N_p} \left(\mathcal{V}^T\right)_{in}^{-1} \Phi_n(x) .$$

Es folgt

$$\begin{aligned} \left(\mathcal{G}^{k,jm}\right)_{pq} &= \sum_{r,s=1}^{N_p} \int_{D^k} G_{jm}(x) \left(\mathcal{V}^T\right)_{pr}^{-1} \Phi_r(x) \left(\mathcal{V}^T\right)_{qs}^{-1} \Phi_s(x) \\ &= \sum_{r,s=1}^{N_p} \left(\mathcal{V}^T\right)_{pr}^{-1} \left(\mathcal{V}^T\right)_{qs}^{-1} \int_{D^k} G_{jm}(x) \Phi_r(x) \Phi_s(x) . \end{aligned}$$

Das Integral wird durch die Jacobideterminante  $J^k = h^k/2$  auf das Referenzelement  $[-1, 1]$  überführt und mit Hilfe der Gauß-Lobatto Quadratur mit Knotenpunkten  $\xi_i$ , Gewichten  $w_i$  und Ordnung  $N_{GL}$  approximiert:

$$\left(\mathcal{G}^{k,jm}\right)_{pq} \approx \sum_{r,s=1}^{N_p} \left(\mathcal{V}^T\right)_{pr}^{-1} \left(\mathcal{V}^T\right)_{qs}^{-1} \sum_{a=1}^{N_{GL}} G_{jm}(x(\xi_a)) \Phi_r(\xi_a) \Phi_s(\xi_a) w_a J^k .$$

Mit der Definition der Vandermonde-Matrix  $\mathcal{V}_{ij} = \Phi_j(\xi_i)$  aus Gleichung (3.33) lässt sich eine zweite Vandermonde-Matrix  $\tilde{\mathcal{V}}$  der Größe  $N_{GL} \times N_p$  einführen, sodass

$$\begin{aligned} \left(\mathcal{G}^{k,jm}\right)_{pq} &= \sum_{r,s=1}^{N_p} \sum_{a=1}^{N_{GL}} \left(\mathcal{V}^T\right)_{pr}^{-1} \left(\mathcal{V}^T\right)_{qs}^{-1} G_{jm}(x(\xi_a)) \tilde{\mathcal{V}}_{ar} \tilde{\mathcal{V}}_{as} w_a J^k \\ &= \sum_{r,s=1}^{N_p} \sum_{a=1}^{N_{GL}} \left(\mathcal{V}^T\right)_{pr}^{-1} \left(\mathcal{V}^T\right)_{qs}^{-1} G_{jm}(x(\xi_a)) \tilde{\mathcal{V}}_{ra}^T \tilde{\mathcal{V}}_{sa}^T w_a J^k \\ &= \sum_{a=1}^{N_{GL}} \left( \left(\mathcal{V}^{-1}\right)^T \tilde{\mathcal{V}}^T \right)_{pa} \left( \left(\mathcal{V}^{-1}\right)^T \tilde{\mathcal{V}}^T \right)_{qa} G_{jm}(x(\xi_a)) w_a J^k \\ &= \sum_{a=1}^{N_{GL}} \left( \tilde{\mathcal{V}} \mathcal{V}^{-1} \right)_{ap} \left( \tilde{\mathcal{V}} \mathcal{V}^{-1} \right)_{aq} G_{jm}(x(\xi_a)) w_a J^k \end{aligned}$$

folgt. Mit der Definition  $W \equiv \tilde{\mathcal{V}} \mathcal{V}^{-1}$  ergibt sich das behauptete Resultat (3.36).

## Literatur

- [1] M. Wiedenhaus. „Ladungsträgertransport in Halbleiter-Quantenbauelementen“. Dissertation. 2005.
- [2] W. R. Frensley. „Boundary conditions for open quantum systems driven far from equilibrium“. In: *Reviews of Modern Physics* 62.3 (1990), S. 745.
- [3] W. R. Frensley. „Wigner-function model of a resonant-tunneling semiconductor device“. In: *Physical Review B* 36.3 (1987), S. 1570.
- [4] L. Schulz und D. Schulz. „Numerical Analysis of the Transient Behavior of the Non-Equilibrium Quantum Liouville Equation“. In: *IEEE Transactions on Nanotechnology* 17.6 (2018), S. 1197–1205.
- [5] F. Rossi, C. Jacoboni und M. Nedjalkov. „A Monte Carlo solution of the Wigner transport equation“. In: *Semiconductor Science and Technology* 9.5S (1994), S. 934.
- [6] N.C. Kluksdahl, A.M. Krizan, D. K. Ferry und C. Ringhofer. „Self-consistent study of the resonant-tunneling diode“. In: *Physical Review B* 39.11 (1989), S. 7720.
- [7] M. L. Van de Put, B. Sorée und W. Magnus. „Efficient solution of the Wigner–Liouville equation using a spectral decomposition of the force field“. In: *Journal of Computational Physics* 350 (2017), S. 314–325.
- [8] C. L. Gardner und C. Ringhofer. „Approximation of thermal equilibrium for quantum gases with discontinuous potentials and application to semiconductor devices“. In: *SIAM Journal on Applied Mathematics* 58.3 (1998), S. 780–805.
- [9] L. Schulz und D. Schulz. „Application of a slowly varying envelope function onto the analysis of the Wigner transport equation“. In: *IEEE Transactions on Nanotechnology* 15.5 (2016), S. 801–809.
- [10] R.K. Mains und G.I. Haddad. „Wigner function modeling of resonant tunneling diodes with high peak-to-valley ratios“. In: *Journal of Applied Physics* 64.10 (1988), S. 5041–5044.
- [11] G. Czycholl. „Theoretische Festkörperphysik Band 1: Grundlagen: Phononen und Elektronen in Kristallen“. Springer-Verlag, 2015.
- [12] L. E. Reichl. „A modern course in statistical physics“. University of Texas Press, 1980.
- [13] W. R. Frensley und N.G. Einspruch. „Heterostructures and quantum devices“. Bd. 24. Elsevier, 1994.
- [14] R. Rosati, F. Dolcini, R.C. Iotti und F. Rossi. „Wigner-function formalism applied to semiconductor quantum devices: failure of the conventional boundary condition scheme“. In: *Physical Review B* 88.3 (2013), S. 035401.
- [15] R. Landauer. „Electrical resistance of disordered one-dimensional lattices“. In: *Philosophical magazine* 21.172 (1970), S. 863–867.



- [16] R. C. Miller, D. A. Kleinman und A. C. Gossard. „Energy-gap discontinuities and effective masses for GaAs – Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As quantum wells“. In: *Phys. Rev. B* 29 (12 Juni 1984), S. 7085–7087. DOI: 10.1103/PhysRevB.29.7085.
- [17] H. L. Grubin, T. R. Govindan, J. P. Kreskovsky und M. A. Strosio. „Transport via the Liouville equation and moments of quantum distribution functions“. In: *Solid-State Electronics* 36.12 (1993), S. 1697–1709.
- [18] M. O. Watanabe, J. Yoshida, M. Mashita, T. Nakanisi und A. Hojo. „Band discontinuity for GaAs/AlGaAs heterojunction determined by C-V profiling technique“. In: *Journal of applied physics* 57.12 (1985), S. 5340–5344.
- [19] E. Wigner. „On the Quantum Correction For Thermodynamic Equilibrium“. In: *Phys. Rev.* 40 (1932), S. 749.
- [20] A. Arnold. „On absorbing boundary conditions for quantum transport equations“. In: *ESAIM: Mathematical Modelling and Numerical Analysis* 28.7 (1994), S. 853–872.
- [21] L. Schulz und D. Schulz. „Boundary Concepts for an Improvement of the Numerical Solution with regard to the Wigner Transport Equation“. In: *2018 International Conference on Simulation of Semiconductor Processes and Devices (SISPAD)*. IEEE. 2018, S. 75–78.
- [22] H. Jiang, T. Lu und W. Cai. „A device adaptive inflow boundary condition for Wigner equations of quantum transport“. In: *Journal of Computational Physics* 258 (2014), S. 773–786.
- [23] A.M. Krivan, N.C. Kluksdahl und D.K. Ferry. „Scattering states and distribution functions for microstructures“. In: *Physical Review B* 36.11 (1987), S. 5953.
- [24] R. Li, T. Lu und Z. Sun. „Stationary Wigner equation with inflow boundary conditions: will a symmetric potential yield a symmetric solution?“ In: *SIAM Journal on Applied Mathematics* 74.3 (2014), S. 885–897.
- [25] I. Dimov, M. Nedjalkov, J.-M. Sellier und S. Selberherr. „Boundary conditions and the Wigner equation solution“. In: *Journal of Computational Electronics* 14.4 (2015), S. 859–863.
- [26] Haiyan Jiang, Wei Cai und Raphael Tsu. „Accuracy of the Frensley inflow boundary condition for Wigner equations in simulating resonant tunneling diodes“. In: *Journal of Computational Physics* 230.5 (2011), S. 2031–2044.
- [27] F. Rossi. „Theory of semiconductor quantum devices: microscopic modeling and simulation strategies“. Springer Science & Business Media, 2011.
- [28] E. Y. Wilner, H. Wang, M. Thoss und E. Rabani. „Nonequilibrium quantum systems with electron-phonon interactions: Transient dynamics and approach to steady state“. In: *Physical Review B* 89.20 (2014), S. 205129.
- [29] L. Zhang, J. Chen und J. Wang. „First-principles investigation of transient current in molecular devices by using complex absorbing potentials“. In: *Physical Review B* 87.20 (2013), S. 205401.

- [30] R. Lake und S. Datta. „Nonequilibrium Green’s-function method applied to double-barrier resonant-tunneling diodes“. In: *Physical Review B* 45.12 (1992), S. 6670.
- [31] G. Cohen und E. Rabani. „Memory effects in nonequilibrium quantum impurity models“. In: *Physical Review B* 84.7 (2011), S. 075150.
- [32] C. S. Lent und D. J. Kirkner. „The quantum transmitting boundary method“. In: *Journal of Applied Physics* 67.10 (1990), S. 6353–6359.
- [33] S. Datta. „Quantum transport: atom to transistor“. Cambridge university press, 2005.
- [34] J. S. Hesthaven und T. Warburton. „Nodal discontinuous Galerkin methods: algorithms, analysis, and applications“. Springer Science & Business Media, 2007.
- [35] V. Dolejsi und M. Feistauer. „Discontinuous galerkin method“. In: *Analysis and Applications to Compressible Flow. Springer Series in Computational Mathematics* 48 (2015).
- [36] D. A. Di Pietro und A. Ern. „Mathematical aspects of discontinuous Galerkin methods“. Bd. 69. Springer Science & Business Media, 2011.
- [37] S. Brenner und R. Scott. „The mathematical theory of finite element methods“. Bd. 15. Springer Science & Business Media, 2007.
- [38] Y. Xu und C.-W. Shu. „Local discontinuous Galerkin methods for nonlinear Schrödinger equations“. In: *Journal of Computational Physics* 205.1 (2005), S. 72–97.
- [39] R. J. LeVeque. „Numerical methods for conservation laws“. Bd. 132. Lectures in Mathematics. Birkhäuser Verlag, 1990.
- [40] Miloslav Feistauer und K. Švadlenka. „Discontinuous Galerkin method of lines for solving nonstationary singularly perturbed linear problems“. In: *Journal of Numerical Mathematics jnma* 12.2 (2004), S. 97–117.
- [41] M. Feistauer, J. Hájek und K. Švadlenka. „Space-time discontinuos Galerkin method for solving nonstationary convection-diffusion-reaction problems“. In: *Applications of Mathematics* 52.3 (2007), S. 197–233.
- [42] P. Lesaint und P.-A. Raviart. „On a finite element method for solving the neutron transport equation“. In: *Publications mathématiques et informatique de Rennes* S4 (1974), S. 1–40.
- [43] B. A. Biegel. „Quantum electronic device simulation“. Diss. Stanford Univ., 1990.

## Index

- analytischer Fehler, 53
- complex absorbing potential, 17
- Continuous Galerkin (CG), 25
- Dichtematrix, 6
- Dichteoperator, 3
- Discontinuous-Galerkin Verfahren, 23
- Driftmatrix, 44, 77
- effektive Masse, 9
- Finite Differenzen, 24
- Finite Elemente, 25
- Finite Volumen, 24
- Fockraum, 4
- Galerkin-Ansatz, 37
- Hartree-Potential, 9, 74
- Hybridverfahren, 29
- hydrodynamische Näherung, 7
- iterativer Fehler, 53
- Konsistenz, 37, 38
- Kontinuitätsgleichung, 13
- Konvergenzordnung, 53
- Liftoperator, 46
- Liouville-von-Neumann-Gleichung, 10, 14
- Liouvilleoperator, 11
- lokale Darstellung der Ritz-Approximation, 42
- Massematrix, 44
- Mean-Field-Näherung, 5
- Methode der Geraden, 29
- modale Darstellung, 43
- nicht-konforme Methode, 28
- nodale Darstellung, 43
- nonequilibrium Green's function, 20
- numerischer Fluss, 37
- Poisson-Gleichung, 9, 74
- quantenmechanisches Ensemble, 3
- Rankine-Hugoniot-Bedingung, 31
- Reduzierter Dichteoperator, 4
- resonante Tunneldiode, 7
- Riemann-Problem, 30
- Ritz-Approximation, 28
- Schrödingergleichung, 9
- schwache Formulierung, 27
- schwache Lösung, 27
- Schwache variationale Formulierung der LNG, 39
- Sprungantwort, 66
- Starke variationale Formulierung der LNG, 39
- stationärer Fall, 12
- Steifigkeitsmatrix, 44
- Transfermatrix Method, 21
- transienter Fall, 12
- Upwind Fluss, 49
- Upwind-Fluss, 26, 38, 63
- Upwind-Schema, 26
- Vandermonde-Matrix, 43
- Wigner-Funktion, 14
- Wigner-Gleichung, 14
- Zeitentwicklung, 49
- zweite Quantisierung, 5



## Eidesstattliche Versicherung

Ich versichere hiermit an Eides statt, dass ich die vorliegende Abschlussarbeit mit dem Titel „Diskontinuierliche Galerkin Methoden zur Lösung der Liouville-von-Neumann-Gleichung“ selbstständig und ohne unzulässige fremde Hilfe erbracht habe. Ich habe keine anderen als die angegebenen Quellen und Hilfsmittel benutzt, sowie wörtliche und sinngemäße Zitate kenntlich gemacht. Die Arbeit hat in gleicher oder ähnlicher Form noch keiner Prüfungsbehörde vorgelegen.

---

Ort, Datum

---

Unterschrift

## Belehrung

Wer vorsätzlich gegen eine die Täuschung über Prüfungsleistungen betreffende Regelung einer Hochschulprüfungsordnung verstößt, handelt ordnungswidrig. Die Ordnungswidrigkeit kann mit einer Geldbuße von bis zu 50 000 £ geahndet werden. Zuständige Verwaltungsbehörde für die Verfolgung und Ahndung von Ordnungswidrigkeiten ist der Kanzler/die Kanzlerin der Technischen Universität Dortmund. Im Falle eines mehrfachen oder sonstigen schwerwiegenden Täuschungsversuches kann der Prüfling zudem exmatrikuliert werden (§ 63 Abs. 5 Hochschulgesetz –HG–).

Die Abgabe einer falschen Versicherung an Eides statt wird mit Freiheitsstrafe bis zu 3 Jahren oder mit Geldstrafe bestraft.

Die Technische Universität Dortmund wird ggf. elektronische Vergleichswerkzeuge (wie z. B. die Software „turnitin“) zur Überprüfung von Ordnungswidrigkeiten in Prüfungsverfahren nutzen.

Die oben stehende Belehrung habe ich zur Kenntnis genommen.

---

Ort, Datum

---

Unterschrift