§12 Zeitentwicklung in der Quantenmechanik

Ab sofort ist in Strenge

$$\hbar \neq 0 \qquad (0)$$

In diesem §: Lösen der zeitabhängigen Schrödingergleichung

$$H\,|\psi\rangle = i\hbar \frac{\partial}{\partial t}|\psi\rangle \qquad (1)$$

für stationäre H $\left(\frac{\partial H}{\partial t} = 0\right)$ und für zeitlich periodische H: $H(t+T) = H(t)$.

12.1 Stationäre beschränkte H: die Tschebyscheff-Methode

Betonung

Pafnuti Lwowitsch Tschebyschow (1821–1894)

(Čebyšëv, Chebyshev, Tchebychef, ...)

Lehrer von Andrei Andrejewitsch Markow, Alexander Michailowitsch Ljapunow

Was ist die Idee? — Trennung der strukturellen / spektralen Information von der Zeitabhängigkeit bei z.B. Totaldiagonalisierung:

$$H = \sum_\nu \varepsilon_\nu |\nu\rangle\langle\nu| \qquad (2)$$

(Spektraldarstellung)

$\Rightarrow$ Lösung von (1):

$$|\psi(t)\rangle = e^{-iHt/\hbar}\,|\psi(0)\rangle$$

nur einmal ausrechnen.

$$= \sum_\nu e^{-i\varepsilon_\nu t/\hbar}\,|\nu\rangle\langle\nu|\psi_0\rangle \qquad (3)$$

Die Tschebyscheff-Methode schafft das ähnlich, aber ohne Totaldiagonalisierung.

Benötigen Werkzeug!

Tschebyscheff-Polynome

gehören zur Familie der orthogonalen Polynome

Gegeben: positive Gewichtsfunktion $w(x)$ auf $[a,b]$
$\Rightarrow$ Def. Skalarprodukt

$$\langle f|g\rangle := \int_a^b dx\, w(x)\, f(x)\, g(x) \qquad (4)$$

$\exists$ Folge von Polynomen $p_n(x)$ mit Orthogonalitätsrelation

$$\langle p_n|p_m\rangle = \frac{\delta_{nm}}{h_n} = \frac{\delta_{nm}}{\langle p_n|p_n\rangle} \qquad (5)$$

$\Rightarrow$ „Beliebige" Funktion kann nach $p_n(x)$ entwickelt werden

$$f(x) = \sum_{n=0}^{\infty} \alpha_n p_n(x) \;;\; \alpha_n = \langle p_n|f\rangle h_n \qquad (6)$$

Je nach $[a,b]$ und $w(x)$ gibt es viele verschiedene nützliche orthogonale Polynome, die viele gemeinsame Eigenschaften haben (vgl z.B. Abramowitz & Stegun, Handbook of Math. Functions). Insbesondere alle „französischen Polynome aus Physik IV (Legendre, Laguerre, Hermite) gehören dazu. Wir begeben uns aber von Paris nach St. Petersburg.

$\exists$ zwei Arten von Tschebyscheffpolynomen, beide def. auf $[-1,+1]$

1. Art: $T_n(x)$, $w(x) = \left(\pi\sqrt{1-x^2}\right)^{-1}$
2. Art: $U_n(x)$, $w(x) = \pi\sqrt{1-x^2}$ (7)

Wir bemerken die $T_n(x)$, die sanftmütigsten Polynome:
Von allen Polynomen (Grad n) mit führendem Koeffizienten 1 weicht das Polynom $2^{-n+1}T_n(x)$ auf $[-1,1]$ am wenigsten von Null ab.
(Welche Norm? Keine Ahnung; Aussage aus Gradshteyn – Ryzhyk.)

Bild aus Abramowitz

Dass die T_n durch ± 1 beschränkt sind, sieht man aus (einer der möglichen Definitionen):

$$T_n(x) = \cos(n \arccos x) \qquad (8)$$

Substitution $x = \cos\varphi \Rightarrow \frac{dx}{\sqrt{1-x^2}} = -d\varphi$

$\Rightarrow \langle T_n | T_m \rangle \longrightarrow$ übliche $\perp$-Relation $\langle \cos n\varphi | \cos m\varphi \rangle$

$$\Rightarrow \langle T_n | T_m \rangle = \delta_{nm} \frac{1+\delta_{n,0}}{2} \qquad (9)$$

und aus $\cos((m\pm 1)\varphi) = \ldots$ folgt sogleich die Rekursion

$$T_{m+1}(x) = 2x\,T_m(x) - T_{m-1}(x) \qquad (10)$$

$$(8) \Rightarrow T_0(x) = 1;\; T_1(x) = x;\; T_{-n}(x) = T_n(x) \qquad (11)$$

Der Zeitentwicklungsoperator

... in Tschebyscheff-Darstellung ergibt sich aus

$$\langle T_n | e^{izx} \rangle = \frac{1}{\pi} \int_{-1}^{1} \frac{dx}{\sqrt{1-x^2}} \underbrace{T_n(x)}_{\cos(\arccos nx)} e^{izx}$$

$[x = \cos\varphi]$

$$= \frac{1}{\pi} \int_0^{\pi} d\varphi \, \cos(n\varphi) \, e^{iz\cos\varphi} = i^n J_n(z) \quad (12)$$

mit der Bessel-Funktion (1. Art)

$$J_n(z) = \frac{i^{-n}}{\pi} \int_0^{\pi} d\Theta \, e^{iz\cos\Theta} \cos(n\Theta) \quad (13)$$

$\Rightarrow e^{izx}$ kann <u>für $x \in [-1,1]$</u> nach $\{T_n(x)\}$ entwickelt werden, z kann beliebig sein.

Wir möchten z mit der (beliebigen) Zeit t identifizieren und x mit H bzw. dessen Spektrum („nur einmal ausrechnen"). Es sollte also gelten (vgl. (3))

$$\frac{E_\nu}{\hbar} \in [-1,1] \quad (14),$$

(das Spektrum von) H muss also beschränkt sein; dann können wir mit einer Reskalierung

$$\tilde{H} = \frac{H-b}{a} \quad (15)$$

immer erreichen, dass (14) erfüllt ist.
Man kann die extremalen EW von H z.B. mit der Lanczos-Methode (§8) näherungsweise berechnen; mit einem Sicherheits-Zuschlag ε ergibt sich dann

$$a = \frac{E_{max} - E_{min}}{2-\varepsilon}, \quad b = \frac{E_{max} + E_{min}}{2} \qquad (16)$$

Dann ist der Zeitentwicklungsoperator

$$U(t) = e^{-iHt/\hbar} = e^{-i(a\tilde{H}+b)t/\hbar}$$

$$= e^{-ibt/\hbar}\left(c_0 + 2\sum_{k=1}^{N} c_k T_k(\tilde{H})\right) \qquad (17)$$

mit den Entwicklungskoeff'n

$$c_k = \int_{-1}^{1} dx \, \frac{T_k(x)\, e^{-iaxt/\hbar}}{\pi\sqrt{1-x^2}} = (-i)^k J_k(at/\hbar) \qquad (18)$$

Beachte: • Zeitabhängigkeit komplett in (18), Quantenmechanik findet in (17) statt.
• Sowohl die T_k als auch die J_k erfüllen einfache Rekursionsformeln

<u>Der zeitabhängige Zustand</u>

$$|\psi(t)\rangle = U(t)|\psi(0)\rangle = e^{-ibt/\hbar}\Big(c_0 + 2\sum_{k=1}^{N} \underbrace{c_k}_{t\text{-abhängig (18)}} \underbrace{|\phi_k\rangle}_{\text{eigentlich } c_0}\Big) \qquad (19)$$

wobei

$$|\phi_0\rangle := |\psi(0)\rangle, \quad |\phi_1\rangle = T_1(\tilde{H})|\psi_0\rangle = \tilde{H}|\psi_0\rangle$$

$$|\phi_{m+1}\rangle = 2\tilde{H}|\phi_m\rangle - |\phi_{m-1}\rangle \qquad (20)$$

Vorgehen:

i) Berechne $|\phi_0\rangle \ldots |\phi_N\rangle$ einmal und speichere sie

ii) Berechne $|\psi(t)\rangle$ mit (19) für „beliebige" t.

i) benötigt nur Matrix-Vektor-Multiplikationen
ii) benötigt nur Besselfunktionen

Wahl von N? Beachte Asymptotik der Bessel-funktionen für große k (Abramowitz 9.3.1)

$$J_k(z) \sim \frac{1}{\sqrt{2\pi k}} \left(\underbrace{\frac{e z}{2k}}_{} \right)^k \qquad (21)$$

< 1 für $k > \frac{e z}{2}$

<u>und</u> abnehmend mit k

=> für große k fällt $J_k(z)$ schneller als exponentiell ab.

=> $N \gtrsim 1.5 \frac{a}{\hbar} t_{max}$ liefert gute Ergebnisse für $t < t_{max}$.

Zusatztest: $\langle \Psi(t) | \Psi(t) \rangle \overset{?}{=} \langle \Psi(0) | \Psi(0) \rangle$

Für dünn besetzte Hamilton-Matrizen ist das Verfahren linear in der Zeit & linear in der Matrixdimension.

Schneller <u>und</u> einfacher als Crank-Nicholson, (§4) wo in jedem Schritt ein lineares Gleichungssystem gelöst werden muss.

„Triviales" Beispiel: Berechnung von e^{ixt}.

Formal: ersetze $\frac{a}{\hbar} \hat{H}$ durch $x \cdot \mathbb{1}$.

Crank-Nicholson (vgl §4)

$$U(t) = \left(\frac{1 - i \frac{Ht}{2N}}{1 + i \frac{Ht}{2N}} \right)^N \qquad (20)$$

im Beispiel ist $N = 90$ für CN, $N = 15$ für Tschebyscheff

$\boxed{\text{Bild 19.6 aus}}$

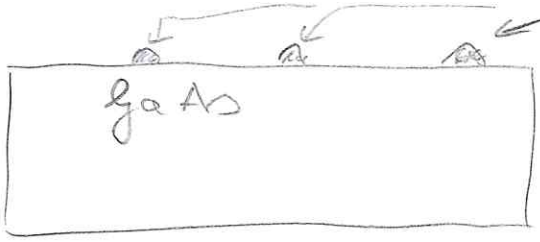
Alexander Weiße und Holger Fehske
Chebyshev Expansion Techniques
Chapter 19, p. 545 - 577
in Lecture Notes in Physics 739 (2007)
Holger Fehske, Ralf Schneider, Alexander Weiße (Eds.)
Computational Many-Particle Physics

12.2 Ein Beispiel: Spinrauschen in Quantenpunkten (QD)

J. Hackmann, Dissertation, TU Dortmund (T II), 2015 (→ Eldorado)

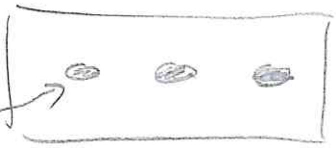
InAs

Experimentell:

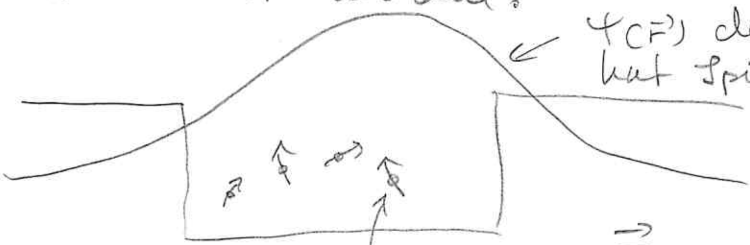


InAs „Tröpfchen" (Gitterfehlpassung, lattice mismatch)

Abdecken mit GaAs ⇒



Potentialtopf: „künstliches Atom", kann mit einem e^- oder h^+ besetzt werden:



$\psi(\vec{r})$ des e^-, hat Spin $\vec{S}$

Kernspins $\vec{I}_k$ des Materials,

WWen mit e^--Spin, $\sim |\psi(\vec{r}_{Kern})|^2$
(Fermi-Kontakt WW)

$\vec{I}_k$ wechselwirken untereinander nur sehr schwach ($\mu_{Kern} \sim \frac{1}{1836}\mu_{Bohr}$)

Modell:

Kopplungsstärke, s.o.

$$H = \vec{S} \cdot \sum_{k=1}^{N} A_k \vec{I}_k \qquad (21)$$

„Zentralspinmodell", Gaudin-Modell

(NB in Hackmanns Dissertation noch einige zusätzliche Komplikationen.)

Experiment (z.B. E II): zirkular polarisiertes Licht koppelt an Spin des e^-; Pump-probe-Experimente ermöglichen, den Spin zeitlich zu verfolgen.

Messgröße ist die Spinrauschfunktion

$$S(t) = \frac{1}{2}\left(\langle S^z(t) S^z\rangle + \langle S^z S^z(t)\rangle\right) - \langle S^z\rangle^2 \qquad (22)$$
$$= S(-t)$$

oder deren Spektralfunktion

$$\mathcal{S}(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} dt\, S(t)\, e^{-i\omega t} \qquad (23)$$
$$= \int_{-\infty}^{\infty} dt\, S(t) \cos\omega t$$

Erfüllt (21) die Voraussetzungen für Anwendung von Tschebyscheff?

- $R_{QD} \sim 100\,\text{Å} \Rightarrow V_{QD} \sim 10^6\,\text{Å}^3 \Rightarrow 10^6$ Atome (Kerne $= N$)
- Im Modell z.B. $N = 20 \Rightarrow \text{Dim}(\mathcal{H}) = 2^{21} = 2\cdot 10^6$ für Spin-$1/2$ (konkret eher $S = 3/2$)
  $\Rightarrow$ Hochdimensionale Hamiltonmatrix.
- $S = 1/2$ oder $3/2 \Rightarrow$ Spektrum ist beschränkt
- Betrachte Standard-Basis: gemeinsame Eigenzustände von S^z und allen I_k^z.

Wirkung eines Terms von (21) $(S = \frac{1}{2}, I = \frac{1}{2})$

$$\vec{S}\cdot\vec{I} = S^z I^z + \frac{1}{2}\left(S^+ I^- + S^- I^+\right) \qquad (24)$$

$$(S^\pm = S^x \pm i S^y,\ I^\pm \text{ analog})$$

$S^z I^z$ diagonal;
2. Term koppelt nur $|\overset{S}{\uparrow}\overset{I}{\downarrow}\rangle \leftrightarrow |\downarrow\uparrow\rangle$

- $\Rightarrow$ dünn besetzt, kann „on the fly" berechnet werden, ohne Speicherung der H-Matrix.

Rechnung:

$$\langle\phi|\, S^z(t)\, S_z\,|\phi\rangle = \langle\phi|\, e^{+iHt/\hbar}\, S_z\, e^{-iHt/\hbar}\, \underbrace{S_z\,|\phi\rangle}_{=:\,|\psi\rangle}$$

Berechne à la Tschebyscheff

$$|\psi(t)\rangle = e^{-iHt/\hbar}\,|\psi\rangle$$
$$|\phi(t)\rangle = \quad '' \quad |\phi\rangle \tag{25}$$

und bilde $\langle\phi(t)|\, S_z\,|\psi(t)\rangle \Rightarrow$ fertig.

Leider liegt im Experiment immer ein Ensemble vielen QDs vor, die auch beileibe nicht in einem reinen Anfangszustand sind, $\Rightarrow$ Beschreibung durch einen Dichteoperator $\hat{\varrho}$ notwendig.

Zu berechnen wäre dann

$$\langle S^z(t)\, S^z\rangle = \mathrm{Sp}\, \varrho\, e^{iHt/\hbar} S^z e^{-iHt/\hbar} S^z$$
$$= \sum_{i=1}^{D} \underbrace{\langle i|\,\varrho}_{\langle\phi_i|}\, e^{iHt/\hbar} S^z\, e^{-iHt/\hbar}\, \underbrace{S^z\,|i\rangle}_{|\psi_i\rangle} \tag{26}$$

(vgl (25))

Dimension von $\mathcal{H} \ggg 1$

D verschiedene Zustände so zeitlich entwickeln („propagieren") wie oben (25) $\Rightarrow$ hoffnungslos.

Trick: Stochastische Auswertung hochdimensionaler Spuren (vgl z.B Weiße & Fehske, loc. cit)

Generiere N_s zufällige Zustände $|r\rangle$

$$|r\rangle = \sum_{i=1}^{D} \xi_{ri}\,|i\rangle \tag{27}$$

wobei die Koeff'n ξ_{ri} reelle Zufallszahlen sind, mit

$$\langle\langle \xi_{ri} \rangle\rangle = 0 \quad , \quad \langle\langle \xi_{ri}\xi_{r'j} \rangle\rangle = \delta_{rr'}\delta_{ij} \qquad (28)$$

wobei $\langle\langle \ \rangle\rangle$ die statistische Mittelung über diese Zufallszahlen bedeutet. Dann gilt für die Spur eines Operators A

$$\left\langle\left\langle \frac{1}{N_s}\sum_{r=1}^{N_s} \langle r|A|r\rangle \right\rangle\right\rangle = \frac{1}{N_s}\sum_{r=1}^{N_s}\sum_{i,j=1}^{D} \langle\langle \xi_{ri}\xi_{rj}\rangle\rangle \langle i|A|j\rangle$$

$$\overset{(28)}{=} \sum_{i=1}^{D} \langle i|A|i\rangle = \mathrm{Sp}\,A \qquad (29)$$

(28) ist erfüllt, wenn man die ξ_{ri} aus einer Gauß-Verteilung zieht. Wenn man in (29) nur „unvollständig mittelt", entsteht ein Fehler; man kann zeigen

$$\frac{1}{N_s}\sum_{r=1}^{N_s} \langle r|A|r\rangle = \sum_{i=1}^{D} \langle i|A|i\rangle + \mathcal{O}\left(\frac{1}{\sqrt{N_s D}}\right) \qquad (30)$$

(D im Nenner ist der Clou!)

In der Praxis liefert für unser System $N_S = 5$ gute Ergebnisse. Es müssen nur 5 statt D Zustände propagiert werden.

Experimentalphysiker lieben Spektren (23)

Kann man mit Tschebyscheff relativ einfach direkt (ohne Umweg über numerische Berechnung von S(t)) berechnen.

Im konkreten Fall ist das besonders einfach, weil der Dichteoperator besonders einfach ist. Wenn man die Energiestalen des Problems anschaut (→ Hackmann), stellt man fest, dass die Mess-Temperatur von ~ 5K für dieses System effektiv ∞ ist, =>

$$\rho = \frac{1}{D}\mathbb{1} \tag{31}$$

Berechne dann (einen Beitrag der) Spinrauschfunktion (22)

$$\langle S^z(t)S^z\rangle = \frac{1}{D}\,\mathrm{Sp}\Big(\underset{\substack{\uparrow}}{e^{iHt/\hbar}}\, S^z \underset{\substack{\uparrow}}{e^{-iHt/\hbar}} S^z\Big)$$

entwickeln, (17/18)

$$= \sum_{n,m=0}^{\infty} \underbrace{\frac{2-\delta_{n,0}}{\pi}\;\frac{2-\delta_{m,0}}{\pi}}_{h_{nm}}\;\underbrace{\frac{1}{D}\,\mathrm{Sp}\left[T_n(\tilde H)S^z T_m(\tilde H)S^z\right]}_{\mu_{nm}}$$

$$\int_{-1}^{1} d\tilde\omega_1 \int_{-1}^{1} d\tilde\omega_2\; e^{-i(\tilde\omega_1-\tilde\omega_2)at}\,\frac{T_n(\tilde\omega_1)\,T_m(\tilde\omega_2)}{\sqrt{(1-\tilde\omega_1^2)(1-\tilde\omega_2^2)}} \tag{32}$$

Fouriertransformation liefert

$$S(\omega) = \sum_{n,m=0}^{\infty} h_{nm}\,\mu_{nm} \int_{-1}^{1} d\tilde\omega_1 \int_{-1}^{1} d\tilde\omega_2\; \frac{T_n(\tilde\omega_1)\,T_m(\tilde\omega_2)}{\sqrt{(1-\tilde\omega_1^2)(1-\tilde\omega_2^2)}}\;\otimes$$

$$\otimes \underbrace{\int_{-\infty}^{\infty} dt\; e^{-i\left(\frac{\omega}{a}+\tilde\omega_1-\tilde\omega_2\right)at}}_{\frac{2\pi}{a}\,\delta\left(\frac{\omega}{a}-\tilde\omega_1-\tilde\omega_2\right)} \tag{33}$$

$$= \sum_{n,m=0}^{\infty} \frac{2\pi}{a}\, h_{nm}\,\mu_{nm} \int_{\alpha}^{\beta} d\tilde\omega\; \frac{T_n(\tilde\omega)\,T_m\left(\tilde\omega+\frac{\omega}{a}\right)}{\sqrt{(1-\tilde\omega^2)\left(1-\left(\tilde\omega+\frac{\omega}{a}\right)^2\right)}}$$

wobei

$$\alpha = -1-\frac{\omega}{a}\,,\quad \beta = 1 \quad \text{für } \omega < 0$$

$$\alpha = -1\,,\quad \beta = 1-\frac{\omega}{a} \quad \text{"} \quad \omega \geq 0$$

Bleibt das $\tilde{\omega}$-Integral numerisch zu berechnen, wobei man mit den Singularitäten im Nenner vorsichtig sein sollte.