

单粒子表象下的基组展开

$$\psi_p(r, t) = \sum_j c_j(t) \phi_j(r, R)$$

含时 Kohn-Sham 方程

$$i\hbar \frac{\partial \psi_p(r, t)}{\partial t} = \mathcal{H}(r; R) \psi_p(r, t)$$

非绝热耦合量

$$d_{jk} = \langle \phi_j | \frac{\partial}{\partial t} | \phi_k \rangle$$

系数演化方程

$$i\hbar \dot{c}_j(t) = \sum_k c_k(t) (\epsilon_k \delta_{jk} - i\hbar d_{jk} + A_{jk})$$

电子-光子相互作用量

$$A_{jk} = -\langle \phi_j | \mathcal{H}_{\text{int}} | \phi_k \rangle$$

最小面跳跃法的概率 (声子和光子共同贡献)

$$P_{jk}(t, \Delta t) = \max \left[-\frac{2 \int_t^{t+\Delta t} \Re(\rho_{jk} A_{jk} / i\hbar - \rho_{jk} d_{jk}) dt}{\rho_{jj}}, 0 \right]$$

经典路径近似

是否自发辐射?

是

细致平衡因子

$$G_{jk} = P_{jk} B_{jk}; \quad B_{jk} = \begin{cases} e^{-(\epsilon_j - \epsilon_k / k_B T)} & \epsilon_j > \epsilon_k \\ 1 & \epsilon_j \leq \epsilon_k \end{cases}$$

否

结果分析