Liouville 方程式と Semiconductor-Bloch 方程式など

平松信義

平成 29 年 9 月 23 日

1 Liouville 方程式

(縮約) 密度演算子 $\hat{\rho}$ とハミルトニアン $\hat{H}$ はエルミート演算子だから、密度演算子の時間変化は $\hat{H}\hat{\rho}$ の虚部に比例する。

$$\begin{aligned}\frac{\partial\hat{\rho}}{\partial t} &= \frac{1}{i\hbar}(\hat{H}\hat{\rho}-\hat{\rho}\hat{H})\\ &= \frac{1}{i\hbar}[\hat{H}\hat{\rho}-(\hat{H}\hat{\rho})^{\dagger}]\\ &= \frac{2}{\hbar}\mathbf{Im}[\hat{H}\hat{\rho}]\end{aligned}$$

2 Liouville 方程式の Bloch 基底表示: Semiconductor-Bloch 方程式 (SBE) で Coulomb 相互作用を無視したものと一致

(Bloch の定理より) ハミルトニアンの固有状態である。Bloch 基底は完全系を張る。Bloch 基底 $|\Phi_{n,k}>$ に関して Liouville 方程式の行列要素をとったものが SBE である。

$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial t}<\Phi_{n,k}|\hat{\rho}|\Phi_{n',k'}> &= <\Phi_{n,k}|\frac{\partial\hat{\rho}}{\partial t}|\Phi_{n',k'}>\\ &= \frac{2}{i\hbar}<\Phi_{n,k}|[\hat{H}\hat{\rho}-(\hat{H}\hat{\rho})^{\dagger}]|\Phi_{n',k'}>\\ &= \frac{2}{i\hbar}\Sigma_{m,l}[<\Phi_{n,k}|\hat{H}|\Phi_{m,l}><\Phi_{m,l}|\hat{\rho}|\Phi_{n',k'}>-<\Phi_{n,k}|\hat{\rho}|\Phi_{m,l}><\Phi_{m,l}|\hat{H}|\Phi_{n',k'}>]\\ &= \frac{2}{i\hbar}\Sigma_{m,l}[H_{n,k;m,l}\rho_{m,l;n',k'}-\rho_{n,k;m,l}H_{m,l;n',k'}]\end{aligned}$$

$\hat{H}=\hat{H}_S+\hat{H}_I$, $\hat{H}_I=E(x,t)\cdot\hat{x}$
ここで $\rho_{n,k;n',k'}=<\Phi_{n,k}|\hat{\rho}|\Phi_{n',k'}>$, $H_{n,k;n',k'}=<\Phi_{n,k}|\hat{H}|\Phi_{n',k'}>$

3 Liouville 方程式の Wannier 基底表示

Wannier 基底は完全系を張る。時間に依存する [1]

$$\begin{aligned}\frac{\partial\rho_{n',n}(l',l;t)}{\partial t}=\frac{1}{i\hbar}\Sigma_{n'',l''}\{&[\epsilon_{n'}(l'-l'')\delta_{n'n''}]-eE_0\cdot\Delta_{n'n''}(l'-l'')+eV_{n'n''}(l',l'')]\rho_{n'',n}\\ &-[\epsilon_{n}(l''-l)\delta_{n'n''}]-eE_0\cdot\Delta_{n'n''}(l'-l'')+eV_{n'n''}(l',l'')]\rho_{n'',n}\}\end{aligned}$$

ここで $\Phi_{n,k}(x;t) = \frac{1}{\sqrt(N)}\Sigma_l exp(iK\dot{l})A_n(x-l;t)$
$\epsilon_n(l'-l'')$ と $\Delta_{nn'}(l-l')$ は双極子遷移のフーリエ展開に対応
$\epsilon_n(l'-l'') = \frac{1}{N}\Sigma_K exp(-ik\cdot(l-l'))\epsilon_n(k-\frac{e}{\hbar c}A_0)$
$\Delta_{nn'}(l-l') = \frac{1}{N}\Sigma_K exp(-ik\cdot(l-l'))R_{nn'})(k)$
$V_{n'n}(l',l) = \int dx W^*_{n'}(x,l')V(x,t)W_n(x,l)$
$R_{nn'}(k) = \frac{i}{\Omega}\int dx U^*_{n'k}\nabla_k U_{nk}$

参考文献

[1] Gerald J. Iafrate and Joseph B. Krieger. Quantum transport for bloch electrons in inhomogeneous electric fields. *Phys. Rev. B*, 40:6144–6148, Sep 1989.