VI Elektron - Elektron Wechselwirkung

betrachten feststehende Ionen, konzentriere uns auf El-El WW

$$H = \underbrace{\sum_{k\lambda} \varepsilon_{k\lambda} a^+_{k\lambda} a_{k\lambda}}_{\text{freie Bewegg. d. Blochelektronen}} + \underbrace{\frac{1}{2} \sum_{\{1,2,3,4\}} V^{\lambda_1\lambda_2\lambda_3\lambda_4}_{k_1k_2k_3k_4} a^+_{\lambda_1 k_1} a^+_{\lambda_2 k_2} a_{\lambda_4 k_4} a_{\lambda_3 k_3}}_{\text{WW über Coulomb-WW}}$$

λ = Bandindex, $\vec{k}$: Wellenvektor

Coulombmatrixelement:

$$V^{k_1k_2k_3k_4}_{\lambda_1\lambda_2\lambda_3\lambda_4} = \frac{e^2}{\varepsilon_0 V} \frac{1}{|\vec{k}_1 - \vec{k}_3|} \delta_{k_1+k_2, k_3+k_4} \delta_{\lambda_1\lambda_3} \delta_{\lambda_2\lambda_4}$$

$\delta_{\lambda_1\lambda_3} \delta_{\lambda_2\lambda_4}$ aus $V \simeq \int d^3r \int d^3r' \ldots = \sum_{R_n} \sum_{R_n'} \int d^3r_n \int d^3r_n' \ldots$

unter der Vorauss.: $e^{i\vec{k}\vec{r}} \simeq e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}_n}$, $\frac{1}{|\vec{r}-\vec{r}'|} \simeq \frac{1}{|\vec{R}_n - \vec{R}_n'|}$

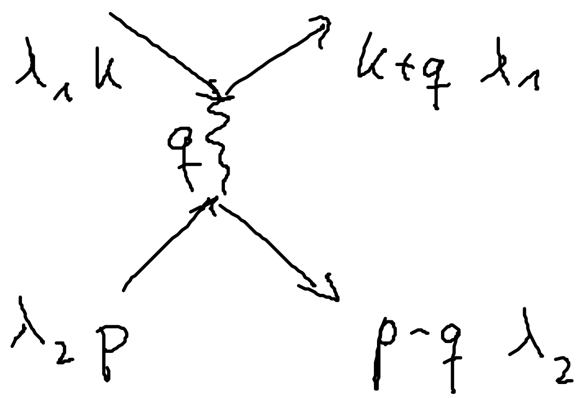
über eine Zelle, verbleibt:

$$\underbrace{\int d^3r_n\, u^*_{\lambda_1}(r_n)\, u_{\lambda_3}(r_n)} \cdot \int d^3r_n'\, u_{\lambda_2} u_{\lambda_4}$$

$\sim \delta_{\lambda_1 \lambda_3} \quad (k \neq 0)$

Ausnutzen der Erhaltungssätze

$$H_{WW} = \frac{1}{2} \sum_{k,p,q} V_q \, a^+_{k+q\,\lambda_1} a^+_{p-q\,\lambda_2} a_{p\lambda_2} a_{k\lambda_1}$$



$$V_q = \frac{e^2}{\varepsilon_0 q^2 V}$$

bisher: Plasmonen als Elementaranregg.
bereits diskutiert f. 1-Bandfall

1. Korrelationsentwicklung der Vielteilchen Coulomb-WW

Grundidee: behandle $H_{WW} = \frac{1}{2} \sum_{abcd} V_{abcd} \, a^+_a a^+_b a_d a_c$

$\hat{=} (\lambda_a k_a)$, $1 \hat{=} (\lambda_1 k_1)$

allgemeines WW-Potential einer 2-Teilchen WW suchen: $\langle a_1^+ a_2 \rangle$, weil diese Strom- und Ladungsdichte bestimmen

$\lambda_1 k_1 \nearrow$

Heisenbergbewegungsgleichung f. $\langle a_1^+ a_2 \rangle$:

$$-i\hbar \partial_t \underbrace{\langle a_1^+ a_2 \rangle}_{\sigma_{12}} = \sum_{abc} \Big(V_{ab1c} \langle a_a^+ a_b^+ a_c a_2 \rangle - V_{2abc} \underbrace{\langle a_1^+ a_a^+ a_c a_b \rangle}_{} \Big)$$

Systematische Verbesserung der HF-Näherung $\longleftarrow$ Problem, weil System nicht geschlossen ist

$$= \sum_{abc} \Big(V_{ab1c} \underbrace{\langle a_a^+ a_b^+ a_c a_2 \rangle}_{(\sigma_{a2}\sigma_{bc} - \sigma_{ac}\sigma_{b2})\ \hat{=}\ \text{Hartree-Fock}} \Big|_{HF} - V_{2abc} \langle a_1^+ a_a^+ a_c a_b \rangle \Big|_{HF} \Big)$$

$$+ \sum_{abc} \Big(V_{ab1c} \underbrace{\delta \langle a_a^+ a_b^+ a_c a_2 \rangle}_{\hat{=}\ \text{Abweichungen von HF}} - V_{2abc}\, \delta \langle a_1^+ a_a^+ a_c a_b \rangle \Big)$$

Def: $\underbrace{\delta\langle a_a^+ a_b^+ a_c a_2 \rangle}_{\sigma^c_{abc2}} = \langle a_a^+ a_b^+ a_c a_2 \rangle - \langle a_a^+ a_b^+ a_c a_2 \rangle\big|_{HF}$

σ^c_{abc2} $\hat{=}$ korrelierter Anteil des Vierererwartungswerts

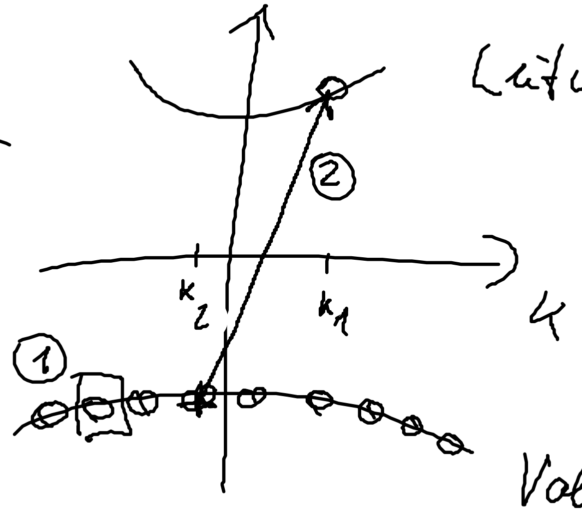
Idee: Man stellt Gleichungen bis zu einer bestimmten Ordnung in $\delta\langle a_1^+ \dots a_n \rangle$ auf und vernachlässigt $\delta\langle a_1^+ \dots a_{n+2} \rangle$, damit werden Fluktuationen weggelassen.

n = 2 $\quad \dot{\sigma}_{12} \simeq \mathcal{F}\left(\sigma_{34}, \cancel{\sigma^c_{1234}}\right)$

n = 4 $\quad \dot{\sigma}^c_{1234} \simeq \mathcal{G}\left(\sigma_{12}, \sigma^c_{1234}, \cancel{\sigma^c_{123456}}\right)$

$\Longrightarrow$ geschlossenes System mit physikalischer Interpretation: $\sigma^c_{1\dots n}$ kann interpretiert werden

Beispiele



eines Halbleiters

① $\langle \underbrace{a^+_{vk}}_{1} \underbrace{a_{vk}}_{1} \rangle = \underbrace{G^{vv}_{k}}_{1}$ Besetzungszahl der Elektronen im Valenzband

② $\langle \underbrace{a^+_{ck_1} a_{vk_2}}\rangle = G^{cv}_{k_1 k_2}$ Übergangsamplitude f. 1 El in vk_2 vernichtet, 1 El in ck_1 erzeugt wird

„Exziton" (El-Loch paar)

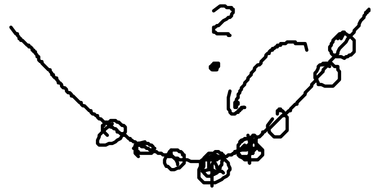
③ $\langle a^+_{ck_1} a_{vk_2} a^+_{vk_2} a_{ck} \rangle$

Anzahl der Exzitonen

(Anzahloperator)

2) Einbandsystem: Boltzmannstoßterm f. El-El WW

$1 \rightarrow k_1 \lambda_1$



ein Band mit Elektronensee, frage uns nach dem Zeitverlauf der Elektronenbesetzg. $\sigma_k = \langle a_k^+ a_k \rangle$ wenn El-El-Stöße (H_{WW}) vorliegen

<u>nötig bis $n = 4$:</u>

$\delta \langle a^+_{k_a} a^+_{k_b} a_{k_c} a_{k_2} \rangle$

$$-i\hbar \dot{\sigma}_1 = \frac{1}{2} \sum_{abc} \left(\bar{V}_{ab1c}\, \underline{\sigma^c_{abc2}} - \bar{V}_{2abc}\, \sigma^c_{1acb} \right)$$

$= k_1 \quad \langle a^+_{k_1} a_{k_1} \rangle$

$$\bar{V}_{1234} \equiv V_{1234} - V_{1243} \quad \text{(Abkürzg.)}$$

$$-i\hbar \dot{\sigma}^c_{1234} = (\varepsilon_1 + \varepsilon_2 - \varepsilon_3 - \varepsilon_4)\, \sigma^c_{1234}$$

$$+ \bar{V}_{4312} \left\{ \sigma_4 \sigma_3 (1-\sigma_2)(1-\sigma_1) - (1-\sigma_4)(1-\sigma_3)\sigma_2\sigma_1 \right\}$$

$$+ f\Big(\underbrace{\sigma^c_{1234}}_{\text{auch weglassen}},\ \cancel{\sigma^c_{123456}} \Big)$$

ε_q

→ führt eigentlich zur Abschirmung des Coulombpotentials $\bar{V}$

Näherungen bei der Lösung

a) σ^c_{1234} Formel lösen ohne $f(\dots)$

$$\sigma^c_{1234}(t) \simeq \int_{-\infty}^{t} dt' \; \underline{e^{i(\varepsilon_1+\varepsilon_2-\varepsilon_3-\varepsilon_4)(t-t')}} \; \underbrace{\text{Quellterm}(t')}_{(\sigma_i(t'))}$$

WW bei $-\infty$ angeschaltet

b) Markoffnäherung $\underline{\delta(\varepsilon_1+\varepsilon_2-\varepsilon_3-\varepsilon_4)}$

c) Matrixelemente V_{1234} als Coulombmatrixelemente einsetzen

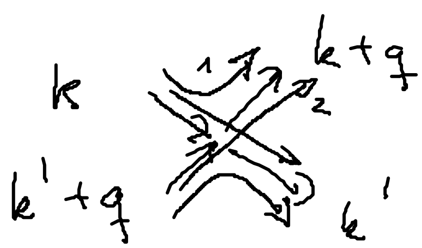
(a–c) ergeben die Stoßterme in der Boltzmanngl. f. El-El WW:

$$\underbrace{\dot{\sigma}_k(t)}_{\substack{\text{Besetzungszahl im}\\ \text{Zustand } k\\ \langle a_k^+ a_k \rangle}}\Big|_{Coulomb} = -4\pi \sum_{k'q} \Big(\underbrace{2\tilde{V}_q^2}_{\text{direkt}_1} - \underbrace{\tilde{V}_q \tilde{V}_{k'-k}}_{\text{indirekt}_2} \Big)\, \underbrace{\delta\left(\varepsilon_k + \varepsilon_{q+k'} - \varepsilon_{k'} - \varepsilon_{q+k}\right)}_{\text{Energieerhaltung beim Stoß}}.$$

$$\Big\{ \underbrace{\sigma_k(t)}_{\text{Ausstreuung}}\, \underbrace{\sigma_{k'+q}(t)}_{\text{Stoßpartner f. } k}\, \underbrace{\big(1-\sigma_{k+q}(t)\big)\big(1-\sigma_{k'}(t)\big)}_{\text{dahin gehen die Stoßpartner}}$$

$$- \underbrace{\big(1-\sigma_k(t)\big)}_{\text{Einstreuung}} \underbrace{\big(1-\sigma_{k'+q}(t)\big)\, \sigma_{k+q}(t)\, \sigma_{k'}(t)}_{\text{analog zu oben}} \Big\}$$

$$\xrightarrow{\text{Einstreung.}} \sigma_k \xrightarrow{\text{Ausstreung.}}$$



$$\tilde{V} \to \frac{V}{\hbar}$$

Bemerkungen

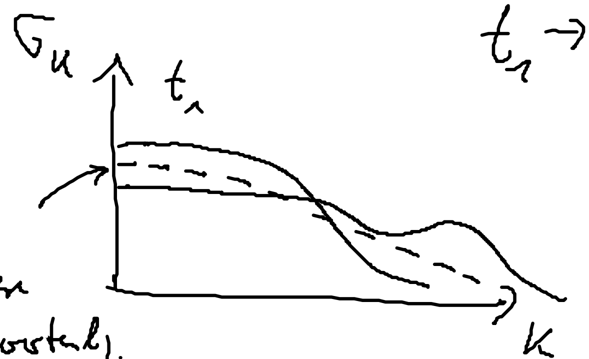
a) Elektron - Elektron WW führt in niedrigster zu El-El Stößen mit Energieerhaltung beim Einzelstoß und zu einer zeitlichen Umverteilung der elektronischen Impulsverteilg. $\sigma_k(t)$, solange diese nicht in G.G. ist.

b) Die stationäre Lsg. $\dot{\sigma}_k\Big|_{Coulomb} = 0$ ist die

Fermiverteilung f. Elektronen für ein von außen eingestellte Temperatur (Zimmer)

c) Nichtgleichgewichtszustände

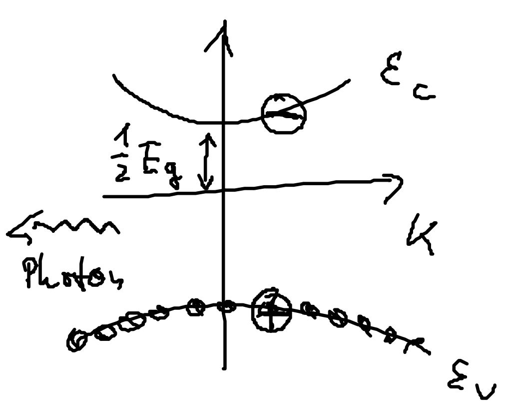
$t_1 \to t_2 \to t_3$ wird durch Boltzmannstoßterm beschrieben



t_3 heißere Fermiverteilg. weil Feld Energie deponiert

Nichtgleichgewicht: t_2: deformiert durch externes Feld

3.) Zweibandsystem: Halbleiterexzitonen



gefülltes Valenzband und leeres Leitungsband als einfachstes HL-Modell

Übergangsamplitude: $G^{vc}_{k_1k_2} = \langle a^{\dagger}_{vk_1} a_{ck_1} \rangle$

$$\varepsilon_c = \frac{E_g}{2} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_c} \quad , \quad \varepsilon_v = -\frac{E_g}{2} - \frac{\hbar^2 k^2}{2m_h}$$

<u>Ziel:</u> $\sigma^{vc}_{k_1 k_2}$ zu berechnen, werden sehen, daß wasserstoffähnliche Objekte („Exzitone" aus El/Lo) entstehen

$$-i\hbar\, \dot{\sigma}^{vc}_{k_1 k_2} = [\underline{H}, a^{+}_{vk_1} a_{ck_2}]$$ hat 2 Beiträge (H_0, H_{WW})

$$-i\hbar\, \dot{\sigma}^{vc}_{k_1 k_2}\Big|_{H_0} = (\varepsilon_{vk_1} - \varepsilon_{ck_2})\, \sigma^{vc}_{k_1 k_2}$$

$$= \left(-E_g - \frac{\hbar^2 k_1^2}{2m_h} - \frac{\hbar^2 k_2^2}{2m_c}\right) \underline{\sigma^{vc}_{k_1 k_2}}$$

$\vec{Q} = \vec{k}_1 - \vec{k}_2 \quad , \quad \vec{q} = \frac{\vec{k}_1 + \vec{k}_2}{2}$ als neue Variablen

$$= \left(-E_g - \frac{\hbar^2 q^2}{2m_{red}} - \frac{\hbar^2 Q^2}{2M}\right) \sigma^{vc}_{\underline{q}}(\underline{Q})$$

$$m_{red} = \frac{m_c m_h}{m_c + m_h} \qquad M = m_c + m_h$$

$n=2$, HF

$$-i\hbar\, \dot{\sigma}^{vc}_{k_1 k_2}\Big|_{H_{WW}} = \sum_{\underline{abc}} \Big(V_{ab1c}\,(\sigma_{a2}\sigma_{bc} - \sigma_{ac}\sigma_{b2}) - \underline{V_{2abc}}\,(\sigma_{1b}\sigma_{ac} - \underline{\sigma_{1c}\sigma_{ab}}) \Big)$$

---- = vorrechnen =

$$V_{k_2-k_b}\,\delta_{\lambda_2\lambda_b}\,\delta_{\lambda_a\lambda_c}\,\delta_{k_2+k_a,\,k_b+k_c}\,\sigma^{\lambda_1\lambda_c}_{k_1k_c}\,\sigma^{\lambda_a\lambda_b}_{k_ak_b}$$

$$= V_{k_c-k_a}\,\sigma^{\lambda_1\lambda_a}_{k_1k_c}\,\sigma^{\lambda_a\lambda_2}_{k_a\;k_2+k_a-k_c}$$

$(k_b = k_2 + k_a - k_c)$

$$= V_{q'}\Big(\sigma^{vv}_{k_1k_c}\,\sigma^{vc}_{k_c-q'\;k_2-q'} - \sigma^{cc}_{k_1k_c}\,\sigma^{cv}_{k_c-q'\;k_2-q'}\Big)$$

$(q' = k_c - k_a)$

$$\underbrace{\sigma^{cc} \approx 0\,,\quad \sigma^{vv} \approx 1}_{\text{wenig Umbesetzung}}$$

$$= V_{q'} \, \sigma^{vc}_{k_1-q' \, k_2-q'}$$

$$-i\hbar \, \dot{\sigma}^{vc}_{k_1 k_2} \Big|_{\text{Hww}} = -\sum_{q'} V_{q'} \, \sigma^{vc}_{k_1-q' \, k_2-q'}$$

$$= -\sum_{q'} V_{q'} \, \sigma^{vc}_{q+q'}(Q)$$

$\downarrow$

$$-i\hbar \, \dot{\sigma}^{vc}_{q}(Q) = \left(-E_g - \frac{\hbar^2 q^2}{2m_{red}} - \frac{\hbar^2 Q^2}{2M} \right) \sigma^{vc}_{q}(Q)$$

$$- \sum_{q} V_{q'} \, \sigma^{vc}_{q+q'}(Q)$$

$$[q, Q] \longrightarrow [r, R]$$

Fouriertrafo

Faltung

$$-i\hbar \, \dot{\sigma}^{vc}(r, R) = \left(-E_g + \frac{\hbar^2 \Delta_r}{2m_{red}} + \frac{\hbar^2 \Delta_R}{2M} + V(r) \right) \sigma^{vc}(r, R)$$

Relativ-bewegung

Schwerpunktsbewegung.

$\rightarrow$ analog. H-Atom (Exziton als korrelierte El-Lo Paar)