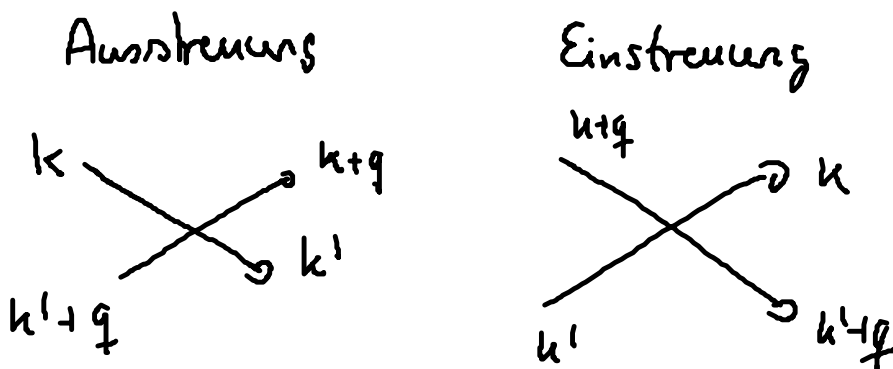


Fortsetzung von 7. Boltzmann Gleichung

$$\dot{p}_{k\sigma} \Big|_{H_C}(t) = \frac{4\pi}{\hbar^2} \sum_{k'q} [\underset{\substack{\uparrow \\ \text{direkter Term}}}{2V(q)} - \underset{\substack{\uparrow \\ \text{Austauschterm}}}{V(q)V(k'-k)}] \delta(\epsilon_k + \epsilon_{k'+q} - \epsilon_{k'} - \epsilon_{k+q})^* \\ \times \left\{ \begin{array}{l} \text{Ausstreuterm} \\ \text{Einstreuterm} \end{array} \right.$$

$\left(-p_k(t) p_{k'+q}(t) [1-p_{k+q}(t)] [1-p_{k'}(t)] \right)$ Ausstreuterm
 $+ \left([1-p_k(t)] [1-p_{k'+q}(t)] p_{k+q}(t) p_{k'}(t) \right)$ Einstreuterm

Kurz: $\dot{p}_k = -S_k^{\text{out}} p_k(t) + S_k^{\text{in}} [1-p_k(t)]$

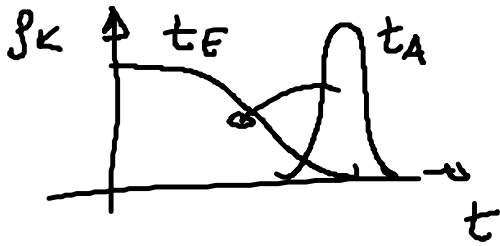


Markov-Approximation \rightarrow Energie-Erhaltung

Pauli-Blocking Terme $(1-p)$

\Rightarrow Zeitliche Umverteilung der elektronischen Besetzung

\Rightarrow Gleichgewichtsverteilung (Fermi-Funktion)



t_A : Anfang: Nichtgleichgewichtsverteilung

t_F : Ende: Fermi-Verteilung

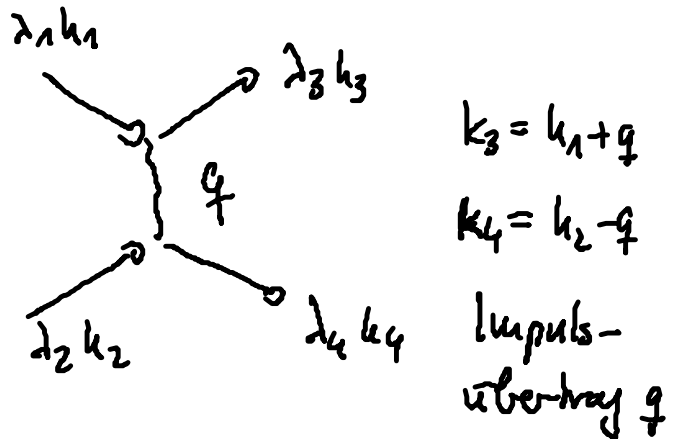
Zusammenfassung Kapitel VII

• Hamilton-Operator:
$$H = \sum_{\ell} \left(\frac{p_{\ell}^2}{2m} \right) a_{\ell}^{\dagger} a_{\ell} + \frac{1}{2} \sum_{\substack{\ell_1 \ell_2 \\ \ell_3 \ell_4}} V_{\ell_1 \ell_2 \ell_3 \ell_4} a_{\ell_1}^{\dagger} a_{\ell_2}^{\dagger} a_{\ell_3} a_{\ell_4}$$

• Coulomb Matrix Elemente

$$V(q) = \frac{e_0}{\epsilon_0 V} \frac{1}{q^2} \delta_{k_1+k_2, k_3+k_4} \delta_{\lambda_1 \lambda_3} \delta_{\lambda_2 \lambda_4}$$

Feynmann Diagramm



• Hartree-Fock-Näherung

$H \rightarrow$ effektive Eintutechen WW: Betrachtung eines Teilchens in einem von allen anderen Teilchen erzeugten effektiven Feld (mean-field-Näherung)

$$H_{\text{eff}} = \sum_{\ell} \epsilon_{\ell} a_{\ell}^{\dagger} a_{\ell}$$

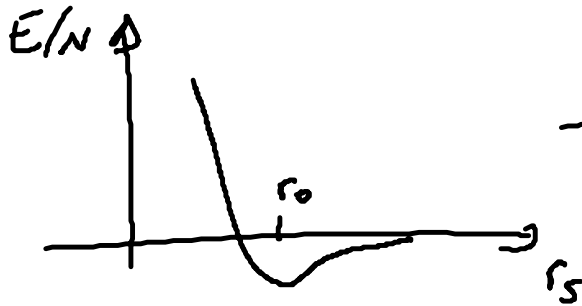
$$\langle H_{eff} \rangle = \sum_{\ell} \epsilon_{\ell} \langle a_{\ell}^{\dagger} a_{\ell} \rangle_{eff} + \frac{1}{2} \sum_{\ell_1 \ell_2} (V_{\ell_1 \ell_2}^{h_1 h_2} - V_{\ell_2 \ell_1}^{h_2 h_1}) \times$$

Variationsprinzip für die freie Energie $\times \langle a_{\ell_1}^{\dagger} a_{\ell_1} \rangle_{eff} \langle a_{\ell_2}^{\dagger} a_{\ell_2} \rangle_{eff}$

• Jellium Modell

$$H = \sum_{kS} \epsilon_k a_{kS}^{\dagger} a_{kS} + \frac{1}{2} \sum_{kpq}^{q \neq 0} \sum_{SS'} V(q) a_{k+qS}^{\dagger} a_{p-qS'} a_{pS} a_{kS}$$

$$E = N \left[\frac{2.21}{r_s^4} - \frac{0.916}{r_s^2} \right] E_{Ryd}$$



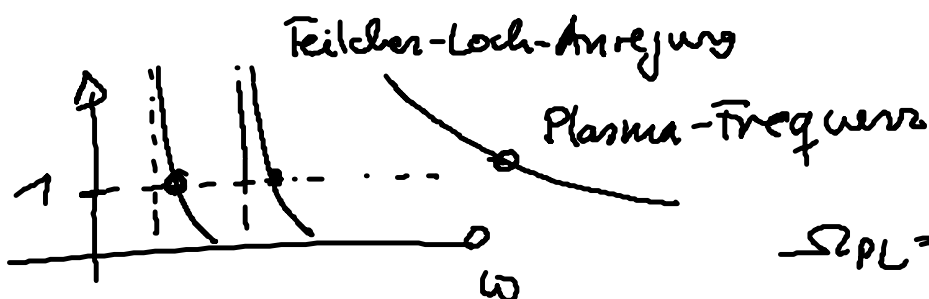
→ Erklärung der metallischen Bindung

- Plasmonen

kollektive Anregungen des Elektronengases

implizite Bestimmung der Dispersionsrelation

$$1 = V(q) \sum_k \frac{f_{k+q} - f_k}{\epsilon_{k+q} - \epsilon_k - \hbar\omega_q} \equiv \bar{\epsilon}_q(\omega)$$



$$\omega_{PL} = \sqrt{\frac{e_0 N}{\epsilon_0 n_0}}$$

- Abschirmung

Lindhard-Formel $\epsilon(q) = 1 - V(q)P(q)$

$$P(q) = \sum_k \frac{f_{k+q} - f_k}{\epsilon_{k+q} - \epsilon_k - \hbar\omega}$$

\Rightarrow Abschirmung des Coulomb-Potentials

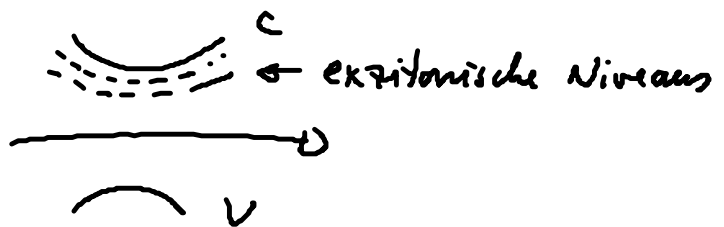
$$W(q) = \frac{V(q)}{\epsilon(q)} = \frac{V(q)}{1 + \left(\frac{\kappa}{q}\right)^2}$$

mit der Abschirmungslänge κ .

- Exzitonen

gebundene Elektron-Loch-Paare

$$E = \underbrace{\frac{\hbar^2 \kappa^2}{2(m_c + m_v)}}_{\text{freie Schwerpunktsbewegung}} - \frac{\mu e^4}{2 \epsilon^2 \hbar^2} \frac{1}{n^2}$$



- Boltzmann-Gleichung
Streuung von Elektronen

$$\dot{f}_k(t) = +S_k^{in} (1 - f_k) - \sum_k^{out} f_k$$

VII. Optische Eigenschaften von Festkörpern

1. Materie-Licht-Wechselwirkung

Die WW eines Elektrons mit elektromagnetischem Feld

$$H = \frac{1}{2m} (\vec{p} - e\vec{A}(\vec{r}, t))^2 + e\phi(\vec{r}, t) + V(\vec{r})$$

Strahlungspeicherung: $\nabla \cdot \vec{A} = 0$ impliziert, daß
 $\phi = 0$ $[\vec{p}, \vec{A}] = 0$

$$H = H_0 + H_{e-f} = \left[\frac{p^2}{2m} + V(\vec{r}) \right] + \left[-\frac{e}{m} \vec{p} \cdot \vec{A}(\vec{r}, t) + \frac{e^2}{m} A^2(\vec{r}, t) \right]$$

lineare
Optik,
daher A
klein

Häufig: Dipolnäherung

$$\vec{A}(\vec{r} + \vec{r}_0, t) = A(t) e^{i\vec{k} \cdot (\vec{r} + \vec{r}_0)}$$
$$\approx A(t) e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}_0}$$

$$\frac{\vec{k} \cdot \vec{r}}{\lambda} \ll 1$$

Impuls des Lichts klein
bzw. die Wellenlänge groß
(im Vergleich zu Streupartikel)

d.h. Vektorpotential unabhängig von \vec{r}

$$H_{e-f} = -\frac{e}{m} \vec{p} \cdot \vec{A}(\vec{r}_0, t) \quad \vec{p} \cdot \vec{A} \text{ Hamiltonian}$$

Anderer Form $H_{e-f} = -e\vec{r}_0 \cdot \vec{E}(\vec{r}_0, t) \quad \vec{r} \cdot \vec{E} \text{ Hamiltonian}$

↓ Eichtransformation

In der 2. Quantisierung:

$$H_{e-f} = \frac{1}{V} \sum_{1,2} \int d^3 r e^{-i(\vec{k}_1 - \vec{k}_2) \cdot \vec{r}} \left[-e \vec{r} \cdot \vec{E}(r, t) \right] u_1^*(r) u_2(r)$$

↙ Blochfunktionen
↗ kann im Rahmen der Dipolnäherung rausprojiziert werden

$1,2 \rightarrow \lambda, \mu$

Zerlegung des Volumens in Einheitszellen

$$\int_V d^3 r \rightarrow \sum_{R_n} \int_{\Omega} d^3 r_n$$

$$\frac{1}{V} \sum_{R_n} \int_{\Omega} d^3 r_n e^{-i(\vec{k}_1 - \vec{k}_2) \cdot (\vec{R}_n + \vec{r}_n)} \left[-e \vec{r}_n \right] \times u_1^*(\vec{R}_n + \vec{r}_n) u_2(\vec{R}_n + \vec{r}_n)$$

||
u(r_n) Periodizität der Blochfaktoren
↙ Ausgewertet an der Bandkante

$$= \frac{1}{V} \sum_{R_n} e^{-i(\vec{k}_1 - \vec{k}_2) \cdot \vec{R}_n} \left[-e \vec{R}_n \delta_{\lambda_1 \lambda_2} \Omega_0 \quad \textcircled{A} \right. \\ \left. - e \int d^3 r_n u_{\lambda_1}^*(r) \vec{r}_n u_{\lambda_2}(r_n) \right] \textcircled{B}$$

$\vec{d}_{\lambda_1 \lambda_2}$ Dipolmatrixelement

$$H_{e-f} = \frac{1}{V} \sum_{\lambda_1 \lambda_2} \sum_{k_1 k_2} \sum_{R_n} e^{-i(\vec{k}_1 - \vec{k}_2) \cdot \vec{R}_n} \left[-e \vec{R}_n \delta_{\lambda_1 \lambda_2} \Omega_0 - \vec{d}_{\lambda_1 \lambda_2} \right] \times$$

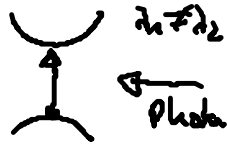
$$\times \bar{E}(\mathbf{R}_n) a_{\lambda_1 k_1}^+ a_{\lambda_2 k_2}$$

Intraband-übergänge



Vorgänge in einem Band \rightarrow elektrischer Transport
siehe Kapitel V

Interband-übergänge



Vorgänge zwischen verschiedenen Bändern
 \vec{d} Maß für die Stärke des Übergangs
Optik

Optische Übergänge in einem Zweibandsystem, d.h. $\lambda_1, \lambda_2 = c, \nu$

Bewegungsgleichungen für $a_{\lambda_1 k_1}^+, a_{\lambda_2 k_2}$ gesucht

$$i\hbar \frac{d}{dt} a_{\nu k_1}^+ a_{c k_2} \Big|_{He-f} = [a_{\nu k_1}^+ a_{c k_2}, H_0-f]$$

$$= \sum_{\mathbf{q}} \left(\vec{d}_{c\nu} \cdot \vec{E}(\mathbf{q}, t) a_{c k_1 + \mathbf{q}}^+ a_{c k_2} - \vec{d}_{\nu c} \cdot \vec{E}(\mathbf{q}, t) a_{\nu k_1}^+ a_{\nu k_2 - \mathbf{q}} \right)$$

Übergangsamplitude
getrieben durch das
 \vec{E} -Feld, das seinen Impulsübertrag \mathbf{q} führt.

$$E(\mathbf{q}, t) = \frac{1}{V} \int d^3 \mathbf{R}_n e^{-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{R}_n} E(\mathbf{R}_n, t)$$

Dipol-Näherung $q \sim \frac{1}{\lambda}$ klein

$$\Rightarrow E(\mathbf{q}, t) = E(t) \delta_{\mathbf{q}, 0}, \text{ d.h. } k_1 \approx k_2$$

$$i\hbar \dot{p}_k \Big|_{He-f} = \vec{d}_{c\nu} \cdot \vec{E}(t) [p_{k_c}^c - p_{k_c}^v]$$

Grenzfall linearer Optik:

$E(t)$ ist klein und ruft nur eine schwache Umbesetzung der Zustände $\Rightarrow p_k^v \approx 1$

$$p_k^c \approx 0$$

$$p_k = \langle a_{v\hbar}^\dagger a_{c\hbar} \rangle$$

$$p_k^c = \langle a_{c\hbar}^\dagger a_{c\hbar} \rangle$$

$$p_k^v = \langle a_{v\hbar}^\dagger a_{v\hbar} \rangle$$

$$\dot{p}_k \Big|_{H_{c,f}} = i \frac{d_{cv} \cdot \vec{E}(t)}{\hbar} = i \frac{\Omega(t)}{\hbar}$$

Rabi-Frequenz

bestimmt die Stärke der Materie-Licht-WW

Hinzufügen von H_0 und H_c

$$p_k(t) = \underbrace{i \omega_k p_k(t)}_{H_0} + \underbrace{i \frac{\Omega(t)}{\hbar}}_{H_{c,f}} - \underbrace{\frac{i}{\hbar} \sum_{k'} V_{ren}(k, k') p_k(t)}_{H_c} - \frac{i}{\hbar} \sum_{k'} V_{exc}(k, k') p_{k'}(t)$$

(A) Renormierung der Bandlücke

$$\tilde{\omega}_k = \omega_k - \frac{1}{\hbar} \sum_{k'} V_{ren}(k, k')$$

abstoßende Elektron-Elektron-WW

(B) Ausbildung von Exzitonen

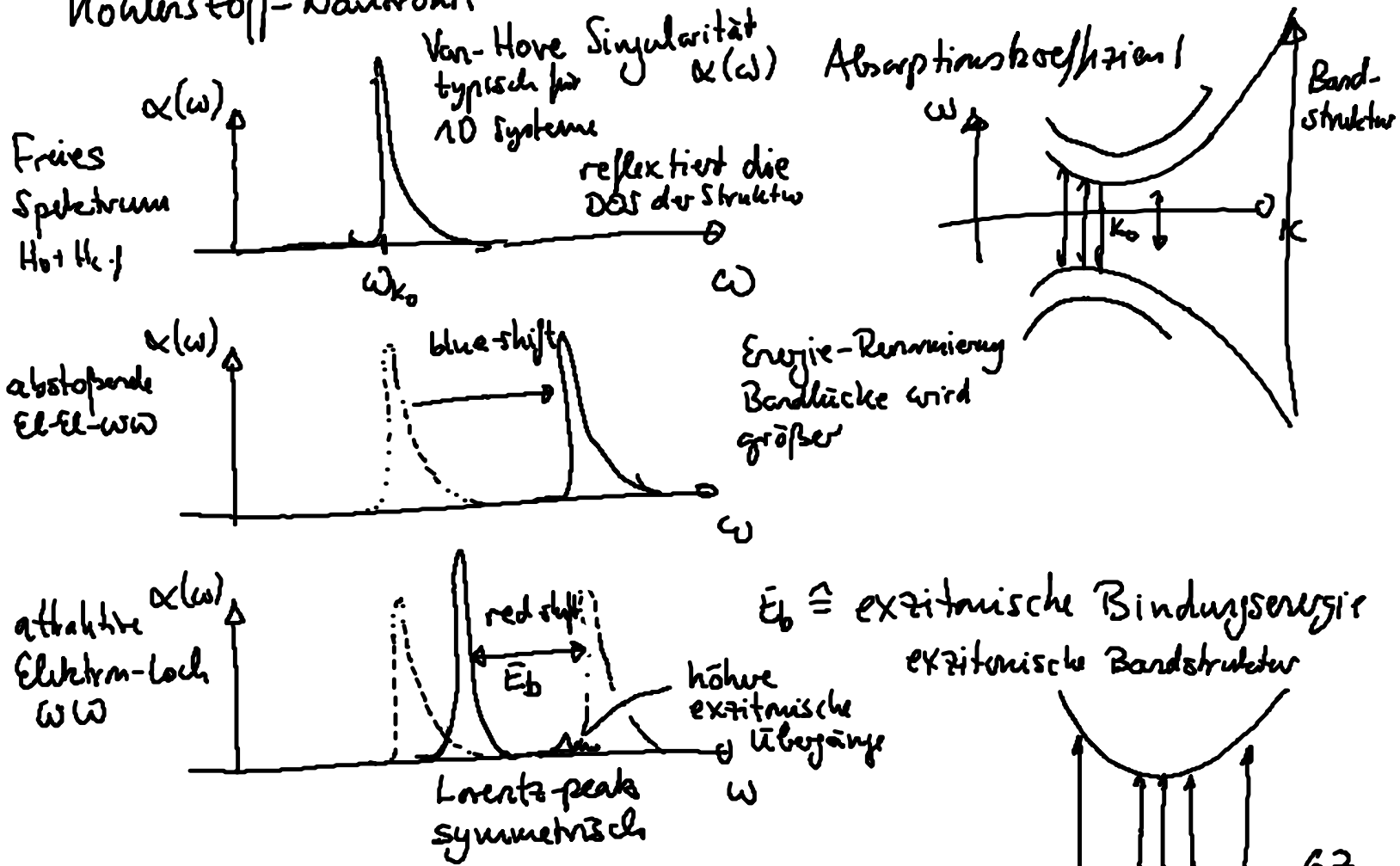
\Rightarrow Renormierung der Rabi-Frequenz

$$\tilde{\Omega}_k(t) = \Omega(t) - \frac{1}{\hbar} \sum_{k'} V_{exc}(k, k') p_{k'}(t)$$

anziehende Elektron-Loc - WW

$$\dot{p}_{1k}(t) = i \underline{\tilde{\omega}}_{1k} p_{1k}(t) + i \underline{\tilde{\Omega}}_{1k}(t)$$

Veranschaulichung anhand von Absorptionsspektren einer Kohlenstoff-Nanoröhre



Oszillatorstärke (Höhe des Peaks) wird ebenfalls verändert.