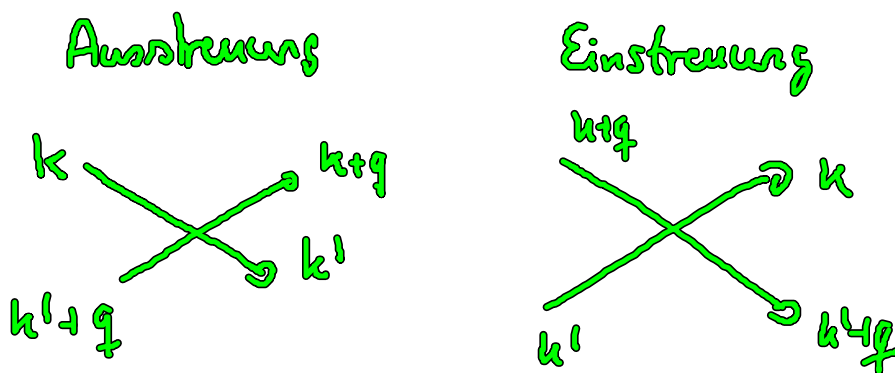


# Fortsetzung von 7. Boltzmann Gleichung

$$\dot{p}_k \Big|_{H_c}(t) = \frac{4\pi}{t^2} \sum_{k', q} [2V(q) - \underbrace{V(q)}_{\text{direkter Term}} \underbrace{V(k'-k)}_{\text{Austauschterm}}] \delta(\epsilon_k + \epsilon_{k+q} - \epsilon_{k'} - \epsilon_{k'+q})$$

$$\times \left\{ \underbrace{-p_k(t)}_{\text{Ausstrahlung}} p_{k+q}(t) [1 - p_{k+q}(t)] [1 - p_{k'}(t)] \right. \\ \left. + [1 - p_k(t)] [1 - p_{k+q}(t)] p_{k+q}(t) p_{k'}(t) \right\} \text{Einstreuung}$$

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

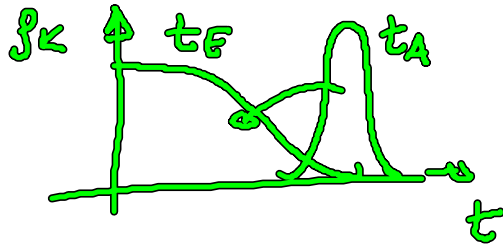


Markov-Approximation  $\rightarrow$  Energie-Erhaltung

Pauli-Blocking Terme  $(1 - p)$

$\Rightarrow$  zeitliche Umverteilung der elektronischen Besetzung

# $\Rightarrow$ Gleichgewichtsverteilung (Fermi-Funktion)



$t_A$ : Anfang: Nichtgleichgewichtsverteilung

$t_F$ : Ende: Fermi-Verteilung

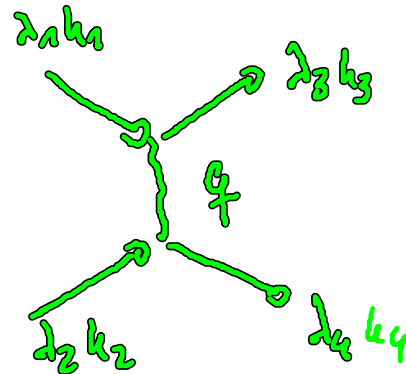
## Zusammenfassung Kapitel VII

• Hamilton-Operator: 
$$H = \sum_{\mathbf{k}} \left( \frac{p_{\mathbf{k}}}{\hbar} \right) a_{\mathbf{k}}^\dagger a_{\mathbf{k}} + \frac{1}{2} \sum_{\substack{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2 \\ \mathbf{k}_3, \mathbf{k}_4}} V_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \mathbf{k}_3, \mathbf{k}_4} a_{\mathbf{k}_1}^\dagger a_{\mathbf{k}_2}^\dagger a_{\mathbf{k}_3} a_{\mathbf{k}_4}$$

• Coulomb Matrix Elemente

$$V(\mathbf{q}) = \frac{e_0}{\epsilon_0 V} \frac{1}{q^2} \delta_{\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2, \mathbf{k}_3 + \mathbf{k}_4} \delta_{\lambda_1 \lambda_3} \delta_{\lambda_2 \lambda_4}$$

Feynman Diagramm



$$k_3 = k_1 + q$$

$$k_4 = k_2 - q$$

Impulsübertrag  $q$

• Hartree-Fock-Näherung

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

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

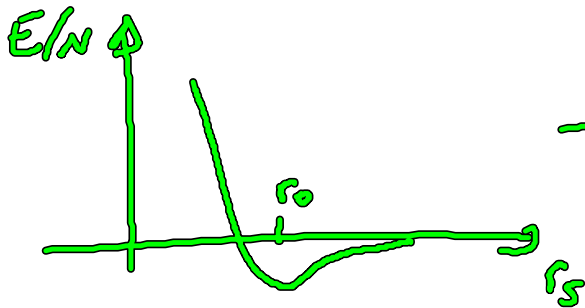
$$\langle H_{\text{eff}} \rangle = \sum_{\ell} \epsilon_{\ell} \langle a_{\ell}^{\dagger} a_{\ell} \rangle_{\text{eff}} + \frac{1}{2} \sum_{\ell_1 \ell_2} (V_{\ell_1 \ell_2}^{h_1 h_2} - V_{\ell_2 \ell_1}^{h_2 h_1}) \times$$

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

### • Jellium Modell

$$H = \sum_{\mathbf{k} \sigma} \epsilon_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k} \sigma}^{\dagger} a_{\mathbf{k} \sigma} + \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k} \neq \mathbf{q}} \sum_{\sigma \sigma'} V(\mathbf{q}) a_{\mathbf{k}+\mathbf{q} \sigma}^{\dagger} a_{\mathbf{p}-\mathbf{q} \sigma'} a_{\mathbf{p} \sigma'} a_{\mathbf{k} \sigma}$$

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



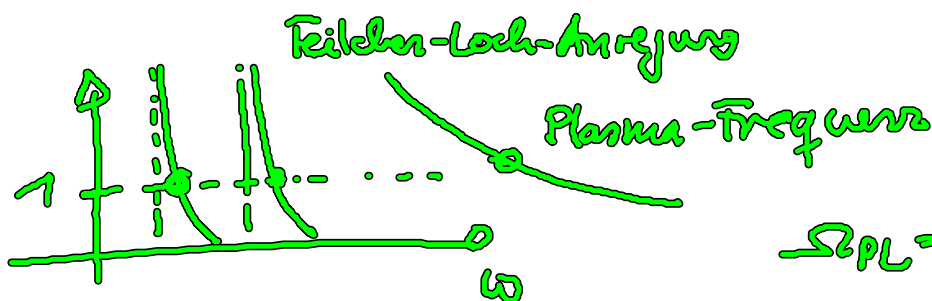
→ Erklärung der metallischen Bindung

### - Plasmonen

kollektive Anregungen des Elektronengases

implizite Bestimmung der Dispersionsrelation

$$1 = V(\mathbf{q}) \sum_{\mathbf{k}} \frac{f_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} - f_{\mathbf{k}}}{\epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} - \epsilon_{\mathbf{k}} - \hbar \omega_{\mathbf{q}}} \equiv \tilde{F}_{\mathbf{q}}(\omega)$$



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

- 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

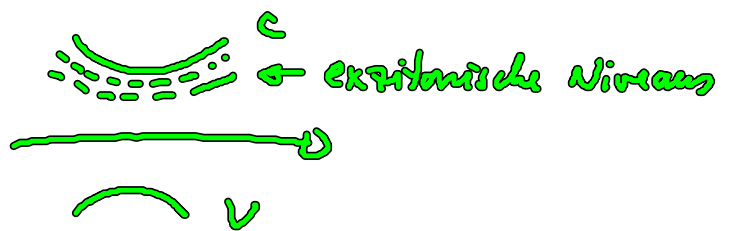
$$W(q) = \frac{V(q)}{\epsilon(q)} = \frac{V(q)}{1 + \left(\frac{\kappa}{q}\right)^2}$$

mit der Abschirmungslänge  $\kappa$ .

- Exzitonen

gebundene Elektron-Loch-Paare

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



- Boltzmann-Gleichung

Streuung von Elektronen

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

## VII. Optische Eigenschaften von Festkörpern

# 1. Materie-Licht-Wechselwirkung

Die Wd eines Elektrons mit elektromagnetischen Feld

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

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

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

linear  
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  $\vec{r}$

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

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

↓ Eichtransformation

In der 2. Quantisierung:

$$H_{eff} = \frac{1}{V} \sum_{\lambda_1 \lambda_2} \int d^3 r e^{-i(\vec{k}_1 - \vec{k}_2) \cdot \vec{r}} \left[ -e \vec{r} \cdot \vec{E}(r, t) \right] u_1^*(r) u_2(r)$$

Blochfunktionen  
 $a_1 + a_2$   
 kann im Rahmen der Dipolnäherung rausgelassen werden

$\lambda_1, 2 \rightarrow \lambda_1, 2$

Zerlegung des Volumens in Einheitszellen

$$\int_V d^3 r \rightarrow \sum_{\vec{R}_n} \int_{\Omega} d^3 r_n$$

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

$$\times u_1^*(\vec{R}_n + \vec{r}_n) u_2(\vec{R}_n + \vec{r}_n)$$

$\parallel$   
 $u(\vec{r}_n)$  Periodizität der Blochfunktion  
 angewendet an der Bandkante

$$= \frac{1}{V} \sum_{\vec{R}} e^{-i(\vec{k}_1 - \vec{k}_2) \cdot \vec{R}_n} \left[ -e \vec{R}_n \delta_{\lambda_1 \lambda_2} \Omega \right. \quad \textcircled{A}$$

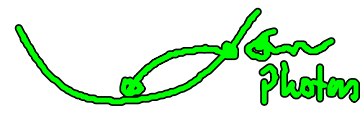
$$\left. - e \int d^3 r_n u_{\lambda_1}^*(r) \vec{r}_n u_{\lambda_2}(r_n) \right] \quad \textcircled{B}$$

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

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

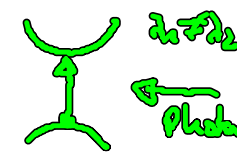
$$\times \vec{E}(\vec{r}_n) a_{\lambda_1 k_1}^+ a_{\lambda_2 k_2}$$

Intraband-Übergänge



Vorgänge in einem Band  $\rightarrow$  elektrischer Transport  
Transport  
 siehe Kapitel IV

Interband-Übergänge



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

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

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

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

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

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

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

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

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

$$i\hbar \dot{p}_k \Big|_{H_{e-f}} = \vec{d}_{cv} \cdot \vec{E}(t) [p_k^c - p_k^v]$$

Grenzfall linearer Optik:

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

$$f_k^c \approx 0$$

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

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

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

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

Rabi-Frequenz

bestimmt die Stärke der Materie-Licht- $\omega$

Hinzufügen von  $H_0$  und  $H_c$

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

(A) Renormierung der Bandlücke

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

abstoßende Elektron-Elektron- $\omega$

(B) Ausbildung von Exzitonen

$\Rightarrow$  Renormierung der Rabi-Frequenz

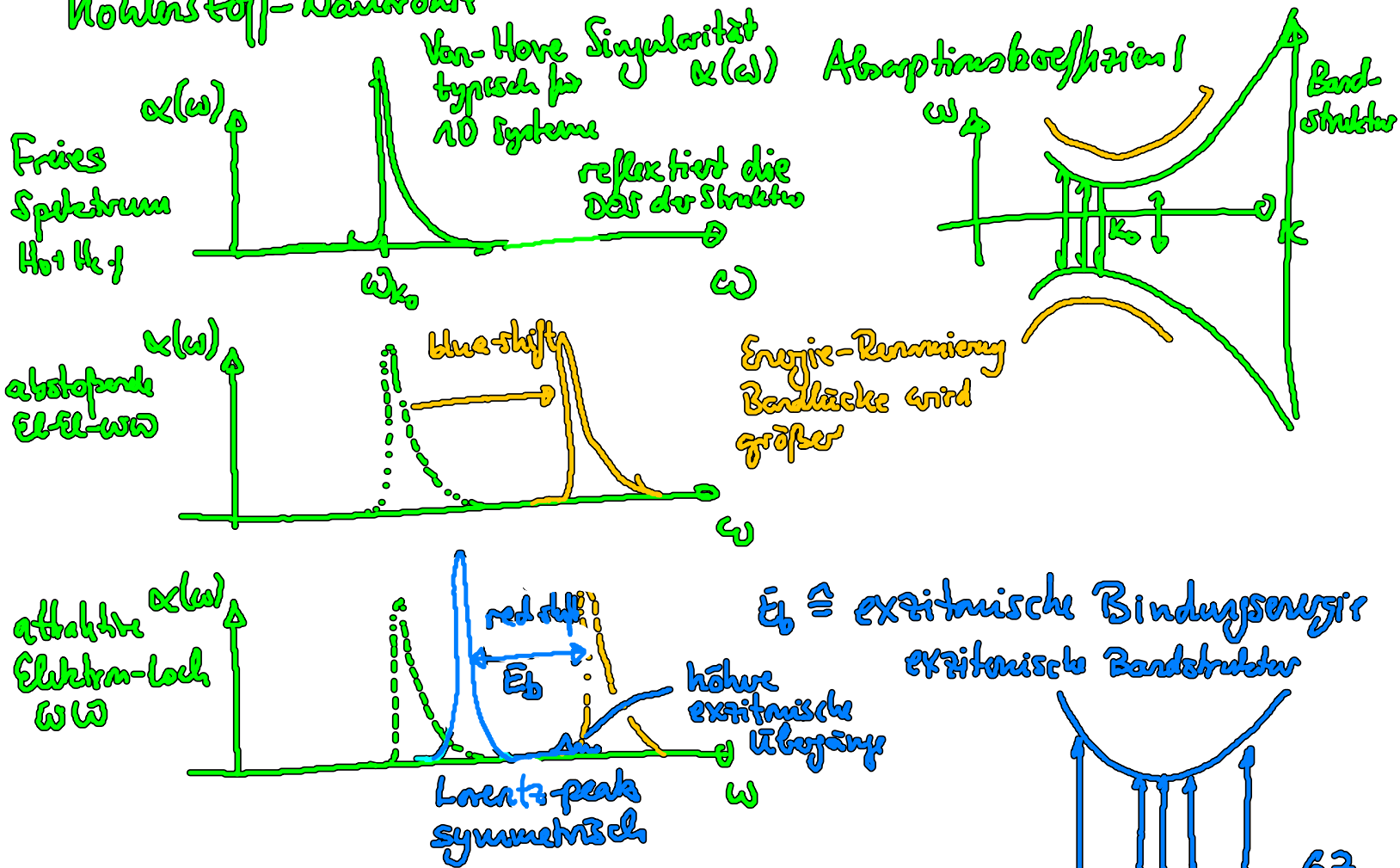
$$\tilde{\Omega}_k(t) = \Omega(t) - \frac{1}{\hbar} \sum_{k'} V_{exc}(k, k') p_k(t)$$

anziehende Elektron-Loc- $\omega$



$$\dot{p}_k(t) = i \tilde{\omega}_{ik} p_{ik}(t) + i \tilde{\Omega}_k(t)$$

Veranschaulichung anhand von Absorptionsspektren einer Kohlenstoff-Nanoröhre



Oszillatorstärke (Höhe des Peaks) wird ebenfalls verändert.