

4. Quantenstatistik

4.1. Dichtematrix - statistischer Operator

4.1.1. Erwartungswerte

(i) (bisher) Reine Zustände

$$|\psi\rangle \in \mathcal{R}^{2N}$$

Wahrscheinlichkeit für das Resultat $|\alpha\rangle$ im reinen Zustand $|\psi\rangle$

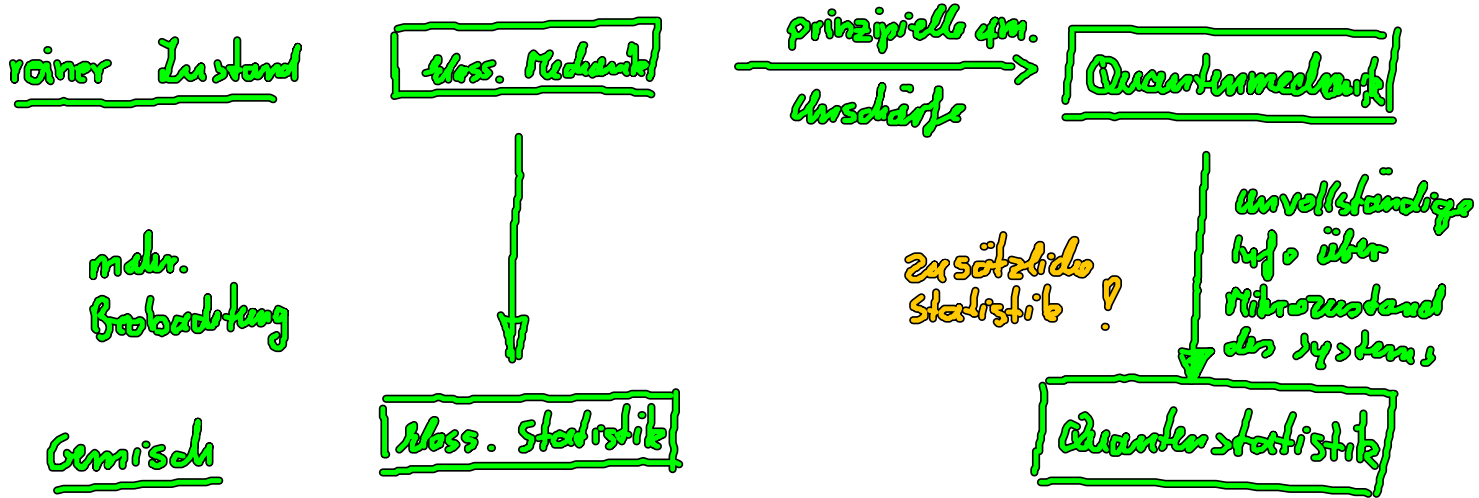
$$|\langle \alpha | \psi \rangle|^2 = \langle \psi | \underbrace{|\alpha\rangle\langle\alpha|}_{\text{Projektor}} | \psi \rangle = \langle \psi | \hat{P}_\alpha | \psi \rangle = c_\alpha$$

ihnen statistischer
Charakter!

Erwartungswert von \hat{M} im Zustand $|\psi\rangle$

$$\begin{aligned} \langle \hat{M} \rangle &= \langle \psi | \hat{M} | \psi \rangle = \sum_\alpha \langle \psi | \hat{M} | \alpha \rangle \langle \alpha | \psi \rangle \\ &= \sum_{\alpha\alpha'} \langle \psi | \alpha' \rangle \langle \alpha | \psi \rangle \underbrace{\langle \alpha' | \hat{M} | \alpha \rangle}_{M_{\alpha\alpha'}} \\ &\text{falls } |\alpha\rangle \text{ Eigenbasis} \\ &= \sum_\alpha c_\alpha M_{\alpha\alpha} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \langle \hat{M} \rangle &= \sum_\alpha \langle \alpha | \psi \rangle \underbrace{\langle \psi | \hat{M} | \alpha \rangle}_{P_\psi} \\ &= \text{tr}(P_\psi \hat{M}) \end{aligned}$$



(ii) Quantenmechanisches Gemisch

- unvollständige Info über Mikrozustand

also Wahrscheinlichkeitsverteilung p_i über möglichen reinen Zustände $|\varphi_i\rangle \in \mathcal{H}^f$

$$\langle \hat{M} \rangle = \sum_i p_i \langle \varphi_i | \hat{M} | \varphi_i \rangle \quad \text{wobei } \sum_i p_i = 1$$

$$= \sum_{i,j} p_i \langle \varphi_i | \hat{M} | \varphi_j \rangle \langle \varphi_j | \varphi_i \rangle$$

$$= \sum_{i,j} \langle \varphi_j | \varphi_i \rangle p_i \langle \varphi_i | \hat{M} | \varphi_j \rangle$$

$$= \sum_j \langle \varphi_j | \hat{S} \hat{M} | \varphi_j \rangle$$

$$\hat{S} = \sum_i p_i |\varphi_i\rangle \langle \varphi_i|$$

↑
statistischer Operator
"Ordnungsmatrix"

$$\langle \hat{M} \rangle = \text{tr} \hat{\rho} \hat{M}$$

(Vorsicht: Operator der Ladungsdichte wird mit $\hat{\rho}$ bezeichnet.)

es gilt: $\text{tr} \hat{\rho} = 1$

$$\left. \begin{array}{l} \hat{\rho}^2 \neq \hat{\rho} \\ \text{tr} \hat{\rho}^2 < 1 \end{array} \right\} \text{(Gleichheit für reinen Zustand: dort ein } \rho_i = 1 \text{ sonst } \rho_i = 0)$$

$$\hat{\rho}^\dagger = \hat{\rho} \rightarrow \hat{\rho} \text{ ist hermitesch}$$

Mittelwert eines Projektionsoperators $| \psi_n \rangle \langle \psi_n |$

$$\text{tr} | \psi_n \rangle \langle \psi_n | \hat{\rho} = \sum_i \rho_i | \langle \psi_n | \psi_i \rangle |^2 = \sum_i \rho_i | c_n^i |^2$$

$\hat{\rho}$ Wahrscheinlichkeit den Zustand $| \psi_n \rangle$ bei Messung zu erhalten

Bem.: reine Zustände \rightarrow Kohärente Überlagerung von Wahrscheinlichkeitsamplituden

$$\langle \hat{M} \rangle = \sum_{\alpha \alpha'} \underbrace{\langle \psi | \alpha \rangle}_{\text{qm. Phasen}} \langle \alpha | M | \alpha' \rangle \underbrace{\langle \alpha' | \psi \rangle}_{\text{qm. Phasen}}$$

\Rightarrow Interferenzterme falls M nicht diagonal in $|\alpha\rangle$

Gemisch \rightarrow inkohärente Überlagerung von reinen Zuständen
 \rightarrow keine Interferenz

4.1.2. Liouville von Neumann Gleichung

Zeitentwicklung der Dichtematrix $\hat{\rho}$ im Schrödingerbild
(Operatoren zeitabh., Zustände zeitab.)

$$\textcircled{1} \quad i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi_i\rangle = \hat{H} |\psi_i\rangle$$

$$-i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \langle\psi_i| = \langle\psi_i| \hat{H}$$

$$\Rightarrow \frac{\partial}{\partial t} \hat{\rho} = \sum_i \rho_i (|\dot{\psi}_i\rangle \langle\psi_i| + |\psi_i\rangle \langle\dot{\psi}_i|)$$

$$\textcircled{2} = -\frac{i}{\hbar} \sum_i \rho_i (\hat{H} |\psi_i\rangle \langle\psi_i| - |\psi_i\rangle \langle\psi_i| \hat{H})$$

$$\boxed{\frac{\partial}{\partial t} \hat{\rho} = -\frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{\rho}]}$$

\uparrow

Liouville von Neumann Gleichung

Vorsicht: nicht verwechseln mit
Bewegungsgleichung für
Operatoren (dort anderes
Vorzeichen)

- Quantenmechanisches Analogon zur Liouville Gleichung
der klass. Mechanik

Bemerkung.: • Für 1 Teilchen im 2-Niveau System (Basis besteht aus 2 Zuständen)

ist $\hat{\rho}$ eine 2×2 Matrix d.h. L.v. Normierung gleichgültig liefert 4 Gleichungen

• Für Vielteilchensystem (HL mit 2 Bänder) wird Basis im Fockraum benötigt

4.1.3. Verteilungsfunktion der Elektronen/Löcher im HL

Betrachte $\langle a_k^\dagger a_k \rangle$ also Mittelwert der Besetzungszahl
im gemischten Zustand $\hat{\rho} = \sum_i p_i |\varphi_i\rangle \langle \varphi_i|$

$|\varphi_i\rangle \in \mathcal{H}^F$: mögliche Verteilung der Elektronen auf erlaubte Zustände k (reiner Zustand)

Bsp.: HL: Grundzustand bei $T=0$



$$\langle a_k^\dagger a_k \rangle = \text{tr} \hat{\rho} a_k^\dagger a_k$$

$$= \sum_i p_i \langle \varphi_i | a_k^\dagger a_k | \varphi_i \rangle$$

$$= \sum_i p_i n_k^i$$

$n_k^i \rightarrow$ Besetzung von k im Zustand $|\varphi_i\rangle$ $n_k^i = 0, 1$

$$= f^e(k)$$

Maximum von $f^e(k) : n_k^i = 1 \quad \forall i$

$$\Rightarrow f^e(k) = \sum_i p_i = 1$$

$\rightarrow f^e(k)$ ist die Wahrscheinlichkeit ein Elektron bei k zu finden

Minimum $f_k^e = 0$

- im reinen Zustand $f^e(k) = 0$ oder $f^e(k) = 1$
- im Gemisch $f^e(k) \in (0, 1)$
- im Gleichgewicht ist $f(k)$ die Fermifunktion

(\rightarrow später in GG Statistik)

Analog: $\langle d_k^\dagger d_k \rangle = f^h(k)$

Bemerkung: Falls Spin als extra Quantenzahl betrachtet wird

$$\rightarrow f^e(k) = \frac{1}{2} \sum_s \langle a_{ks}^\dagger a_{ks} \rangle$$

4.2. Semiklassische Wechselwirkung mit Licht

- WW mit optischem Lichtfeld verursacht Abweichung der Elektronenverteilung vom Gleichgewicht

\rightarrow zusätzlicher Hamiltonoperator \hat{H}_{opt}

Betrachte: Dipolkopplung an elektr. Feld

$$\hat{H}_{\text{opt}} = e \underline{r} \underline{E}(\underline{r}, t) \quad \text{wobei } \underline{E}(\underline{r}, t) \text{ z.B. Laserpuls}$$

extern aufgebracht und
klass. (Maxwell gl.) beschrieben

aber $e \underline{r}$ als QM Dipol Operator
behandelt

=> halbklassisch

4.2.1. Polarisation des Halbleiters

Quantenmechanisch beschriebene Dipoldichte

$$\hat{P}(\underline{r}, t) = e \hat{\psi}^\dagger(\underline{r}, t) \underline{r} \hat{\psi}(\underline{r}, t)$$

$\hat{\psi}^\dagger, \psi$ sind
Feldoperatoren

→ Definiere Polarisation P
als Erwartungswert des Dipol dichte operators \hat{P}

$$\begin{aligned} \nearrow \text{reelle gröÙe} \quad P(\underline{r}, t) &= \langle \hat{P} \rangle \\ &= \langle e \psi^\dagger(\underline{r}, t) \underline{r} \psi(\underline{r}, t) \rangle \end{aligned}$$

• Blochdarstellung

$$\hat{\psi}(\underline{r}, t) = \sum_{n\underline{k}} a_{n\underline{k}} \psi_{n\underline{k}}(\underline{r})$$

Blochwellen

$$\hat{P}(\underline{r}, t) = \sum_{\substack{n\underline{k}' \\ n'\underline{k}'}} a_{n\underline{k}}^+ a_{n'\underline{k}'} \underbrace{\psi_{n\underline{k}}^*(\underline{r}) e_{\underline{r}} \psi_{n'\underline{k}'}}_{e^{i\underline{r} \cdot (\underline{k}' - \underline{k})}}$$

• Fouriertrafo $\hat{P}(\underline{q}, t) = \int d^3r \hat{P}(\underline{r}, t) e^{-i\underline{q} \cdot \underline{r}}$

• Def: Dipolmatrixelement $\mu_{nn'}$

$$\mu_{nn'}(\underline{k}) = \frac{1}{V_{E2}} \int d^3r u_{n\underline{k}} e_{\underline{r}} u_{n'\underline{k}}(\underline{r})$$

(oft auch mit $d_{nn'}$ bezeichnet)

• Näherung: schwache \underline{k} Abhängigkeit der Blochfunktionen $u_{n\underline{k}}$

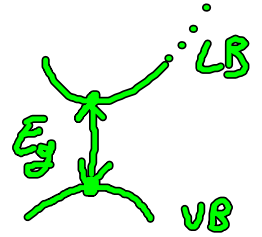
...
längliche
Wellenlänge

$$\Rightarrow P(\underline{q}, t) = - \sum_{nn'\underline{k}} \mu_{nn'}(\underline{k}) \langle a_{n\underline{k}}^+ a_{n'\underline{k}+\underline{q}} \rangle$$

Näherung für optischen Grenzfall:

(1) $q \approx 0$ (Impuls der Photonen klein gegenüber Quantenimpuls der Elektronen)

(2) Bandkantenoptik $\hbar\omega \approx E_g$



→ nur Interbandübergänge (zwischen LB und VB)

(3) 2 Band-Modell: $n = L, V$ und $\mu_{LV}(k) \approx \mu(0)$

konstante Dipolmatrixelement

Elektron-Loch Bild:

$$\Rightarrow P^{\text{makr}}(q, t) = P(0, t) \equiv P(t) = \sum_{\underline{k}} \mu \left(\langle d_{\underline{k}} a_{\underline{k}} \rangle + \langle a_{\underline{k}}^+ d_{\underline{k}}^+ \rangle \right)$$

\downarrow $P(\underline{k}, t)$ \downarrow $P^*(\underline{k}, t)$

$$P(\underline{k}, t) = \langle d_{\underline{k}} a_{\underline{k}} \rangle$$

$$P^*(\underline{k}, t) = \langle a_{\underline{k}}^+ d_{\underline{k}}^+ \rangle$$

\equiv mikroskopische Interband
Polarisation eines Zustandes \underline{k}