5. Boltzmanngleichung

Ziel: Beschreibung von Ladungstransport im Halbleiter

- die Verteilung von Elektronen im Halbleiter $f(r, \underline{k}, t)$ (Wahrscheinlichkeit ein Elektron am Ort r mit Quasiimpuls k zu finden) soll beschrieben werden im Nichtgleichgewicht durch dyn. Transportgleichung

- zu berücksichtigen sind: • Einflüsse äußerer Felder
  • Stöße der Elektronen untereinander

5.1. Beschreibung des Halbleiter als Vielelektronensystem

5.1.1. Skizze der 2 Quantisierung des Schrödinger Wellenfeldes

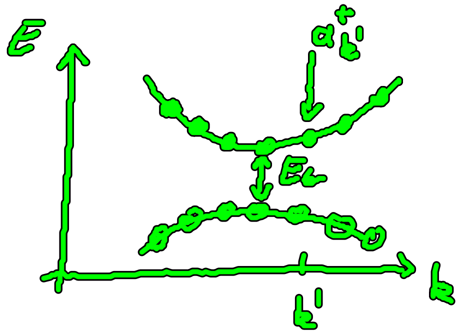
- Erzeuger + Vernichter Operatoren für Elektronen im N-Teilchen Fock-Raum

- Symmetrieeigenschaften (anti-symm.) durch Vertauschungsrelationen erfüllt

$$\{a_k^+ a_k\} = 1$$

Erzeugt Elektron mit Quantenzahl k

• Aus Periodizität des Gitters folgt das Bänderschema → Festkörperphysik Bloch Theorem



Leitungsband $E_L(k) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_e}$

Bandlücke

Valenzband $E_V(k) = -E_G - \frac{\hbar^2 k^2}{2m_h}$

• Elektronen-Loch Bild:

Def.: Defektelektron (Loch) Erzeuger: $d_k^+ = a_{vk}$

$d_k = a^+_{vk}$

↑

Quantenzahl die Bänder kennzeichnet

Bemerkung: Aus Symmetrieeigenschaften des Vielelektronensystems folgt: Loch hat pos. Ladung
pos. Masse

<u>Hamilton Operator für Elektronensystem</u>

$$\hat{H} = \underbrace{\hat{H}_0}_{\text{freier Hamilt.}} + \underbrace{\hat{H}_{opt}}_{\text{WW mit Licht}} + \underbrace{H_{ee} + H_{ii}}_{\text{e-e Stöße durch Coulomb WW}}$$

Stöße über Bandlücke

mit Erhaltung der Loch und Elektronenzahl

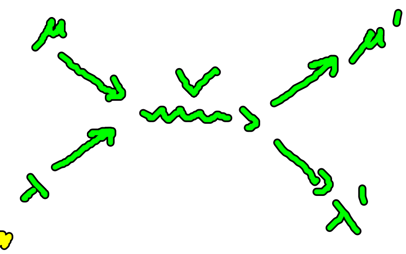
$a_k \hat{=} a_{Lk}$

$$H_0 = \sum_k E_c(k)\, a_k^+ a_k + \sum_k E_v(k)\, d_k^+ d_k$$

kin. Energie der Elektronen + Löcher

Wechselwirkung durch Coulomb WW

Zwei Teilchen Hamiltonian: $H_{12} = \frac{1}{2} \sum_{\substack{\lambda\lambda' \\ \mu\mu'}} \underbrace{\langle \lambda'\mu' | V_{12} | \lambda\mu \rangle} a_{\lambda'}^+ a_{\mu'}^+ a_\mu a_\lambda$



Produktwellenfunktion im Zustand $\langle \lambda'\mu'|$

$$H_{ce} = \sum_{kk'q} V(q) \Big\{ \underbrace{\frac{1}{2} a_k^+ a_{k'}^+ a_{k'+q} a_{k-q}}_{e\text{-}e \text{ Streuung}} + \underbrace{\frac{1}{2} d_k^+ d_{k'}^+ d_{k'+q} d_{k-q}}_{h\text{-}h \text{ Streuung}}$$

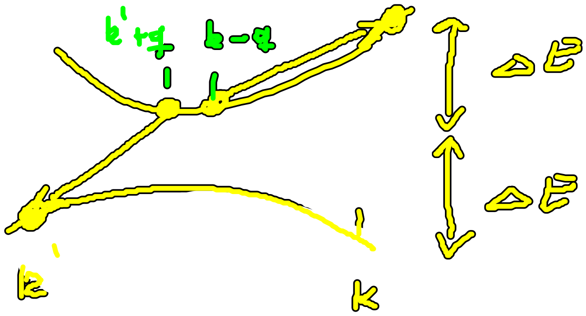
$$- a_k^+ d_{k'}^+ d_{k'+q} a_{k-q} \Big\}$$

e-h-Streuung

q sichert Impulserhaltung

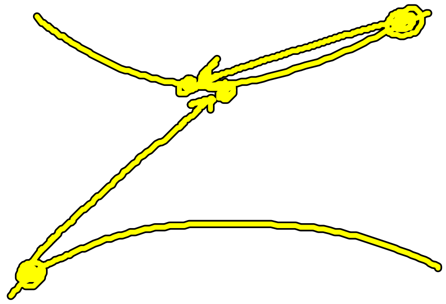
V(q) Coulomb Matrixelement

Stoßionisation bzw. Auger Streuung (keine Teilchenzahlerhaltung in den Bändern



e-Auger Rekombination

$$\underbrace{e+e}_{\text{werden vernichtet}} \longrightarrow \underbrace{e+h}_{\text{erzeugt}}$$



Stoßionisation

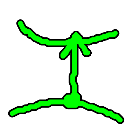
$$e+h \rightarrow e+e$$

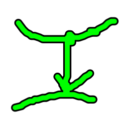
$$\hat{H}_{ii} = \sum_{kk'q} M_q^e \, a^+_{k+q} \, a^+_{k'-q} \, d^+_{-k'} \, a_k + \sum_{kk'q} M^{e*}_{-q} \, a^+_{k'+q} \, d_{-(k'-q)} \, a_{k'} a_k$$

Stoßionisation e-Auger Rekomb.

WW mit Licht

$$\hat{H}_{opt} = \sum_k \left\{ \underline{\mu}_k \underline{E}^+(t) \, a_k^+ d_{-k}^+ + \underline{\mu}_k^* \underline{E}^-(t) \, d_{-k} a_k \right\}$$





(entspricht

Lichtmode

$H_{AF} = \hbar g (\sigma^+ c + c^+ \sigma^-)$

bei WW Atom + Lichtmode)

5.1.2. Dynamische Gleichungen für Verteilungsfunktion f

- für Atom hatten wir Dynamik der reduzierte Dichtematrix

  $\hat{\rho}^A = tr_R \, \rho_{AR}$ betrachtet $\to$ 2x2 Matrix

  Mittelwerte: $\langle \hat{\rho}_{aa} \rangle$ Besetzungswahrsch.

  $\langle \hat{\rho}_{ab} \rangle$ Übergangswahrsch.

Jetzt: Vielteilchensystem

also $\hat{\rho}^S$ ist $(2N \times 2N)$ Matrix (2 Bänder)

wichtig sind zunächst nicht alle Einträge sondern

① Besetzungswahrscheinlichkeit $\langle a_k^+ a_k \rangle = f^e(k)$

$f^e(k)$ ist W. ein Elektron bei k zu finden

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

② mikroskopische Interbandpolarisation

$$p(k,t) = \langle d_k a_k \rangle \qquad \hat{=} \langle \sigma^- \rangle \text{ beim Atom}$$

$$p^*(k,t) = \langle a_k^+ d_k^+ \rangle$$

· Übergangswahrscheinlichkeit im Zustand k für

$N = 3$

$$\begin{pmatrix} f^e(1) & & & p(1) & & \\ & f^e(2) & & & p(2) & \\ & & f^e(3) & & & p(3) \\ p^*(1) & & & f^h(1) & & \\ & p^*(2) & & & f^h(2) & \\ & & p^*(3) & & & f^h(3) \end{pmatrix} = \langle \hat{\rho}^S \rangle$$

Zeitentwicklung von f^e, f^h, p, p^* ist gegeben durch Heisenberg-Gl. der Erwartungswerte

$$\frac{d}{dt}\langle \hat{F} \rangle = \left\langle \frac{i}{\hbar}[\hat{H}, \hat{F}] + \frac{\partial \hat{F}}{\partial t} \right\rangle \qquad \text{(bildunabhängig)}$$

- Berechnen der Kommutatoren:

es gelten die Vertauschungsrelationen

$$a_{vk}^+ a_{vk} = d_k d_k^+ = 1 - d_k^+ d_k$$

$$\{a_k^+ a_k\} = 1$$

$$\{a_k d_{k'}\} = 0$$

$$\{a_k d_k^+\} = 0$$

$$H_0 = \sum_k E_k a_k^+ a_k$$

$$\boxed{\dot{f}^e}$$

$$[H_0, a_\ell^+ a_\ell] = 0$$

$$[H_{opt}, a_\ell^\dagger a_\ell] = -\underline{\mu}\,\underline{E}\,\Big(\underbrace{a_k^\dagger d_k^\dagger}_{\text{gen. von Ladungsträgern}} - \underbrace{d_k a_k}_{\text{Rekomb.}}\Big)$$

$\boxed{\dot{p}}$

$$\langle [H_{opt}, d_\ell a_\ell] \rangle = \underline{\mu}\,\underline{E}\,\Big(\underbrace{f_e(k) + f_h(k) - 1}\Big)$$

Inversion $f_e^L - (\underbrace{1 - f_h}_{f_e^V})$

Polarisation getrieben durch Lichtquelle

$$\langle [H_0, d_\ell a_\ell] \rangle = \langle -\hbar\omega_p(\ell)\, d_\ell a_\ell \rangle$$

freie Oszillation der Polarisation

$\omega_p(\ell) = \frac{1}{\hbar}\left(E_L(\ell) - E_v(\ell)\right)$

Übergangsfrequenz

→ Dynamik ohne Stöße

Halbleiter Bloch Gleichungen

$$\boxed{\begin{aligned} \dot f_e(k,t) &= \frac{1}{i\hbar}\,\underline{\mu}\,\underline{E}\,\left(p^*(k,t) - p(k,t)\right) \\ \dot p(k,t) &= \frac{1}{i}\,\omega_p(k)\,p(k,t) + \frac{1}{i\hbar}\,\underline{\mu}\,\underline{E}\,\left(1 - f_e - f_h\right) \\ \dot f_e &= \dot f_h \end{aligned}}$$

Lösungen sind ungedämpfte Rabi-Oszillationen.

② Dynamik mit Stoßtermen H_{ii}

$$\langle [H_{ii}, a_l^+ a_l] \rangle = \frac{\partial}{\partial t} f^e(l)\Big|_{H_{ii}} \approx \frac{1}{T_1} f^e(l)$$

Ratengleichungs Näherung

T_1 Lebensdauer bzgl. Stöße

$$\langle [H_{ii}, d_l a_l] \rangle = \frac{\partial}{\partial t} p(l)\Big|_{H_{ii}} \approx \frac{1}{T_2} p(l)$$

T_2: Lebensdauer der Polarisation

Problem: Berechnung der Kommutatoren bleiben Terme mit 4 Erz/Vern. Operatoren übrig (in DGL stehen)

z.B. $y_{e1} = \langle a^+_{k+q}\, a^+_{k-q}\, d^+_{-k}\, a_k \rangle$

$\rightarrow$ neue DGL für $\dot{y}_{e1}$

$\rightarrow$ 6'er Op in DGL für $\dot{y}_{e1}$

$\rightarrow$ neue DGL ....

unendliche Hierarchie an Mittelwertgleichungen

Lösung: Abbruch nötig

Beiträge 1. Ordnung:

Faktorisierung der 4'er Mittelwerte in Produkte von 2er Mittelwerte (Hartree-Fock-Näherung)

$$y_{e1} \approx \delta_{q,0} \langle a_k^+ a_k \rangle \langle a_k^+ d_{-k}^+ \rangle - \delta_{k+q,k'} \langle a_k^+ a_k \rangle \langle a_{k'}^+ d_{-k}^+ \rangle$$

$$\approx -\delta_{k+q,k'}\, f_e(k)\, p^*(k')$$