5.1.2. Stoßterme in dynamischen Gleichungen für f(k) und p(k)

- durch Coulomb WW erfahren die Elektronen Impuls + Energie Änderungen

  → Halbleiter Bloch gleichungen müssen ergänzt werden

  0. Näherung: phänomenologisch: effektive Lebensdauer T_1, T_2 von f bzw p

  1. Ordnung der Korrelationsentwicklung:

     - betrachte ein Elektron im eff. Potenzial aller anderen Elektronen d.h. 2 Teilchen WW wird durch eff. 1 Teilchen Hamiltonian (ohne WW) angenähert

       → Faktorisierung der 4'er Mittelwerte in Produkte von 2'er Mittelwerten (also f, p)

≙ Hartree - Fock Näherung

$$\langle a^+_{k+q}\, a^+_{k'-q}\, d^+_{-k}\, a_k \rangle \approx \delta_{k+q,k'}\, f_e(k)\, p^*(k')$$

Für DGL bedeutet das

$$\dot{f}_e(k) = \frac{1}{i\hbar}\left(\underline{\mu}\,\underline{E} + \Delta_p(k)\right)\left(p^*(k,t) - p(k,t)\right) + \frac{\partial}{\partial t} f\Big|_{\hat{H}_{ii}}$$

$$\Delta_p(k) = -\sum_q \left\{ M_e(q) f_e(k-q) - M_h(q) f_h(-(k-q)) \right\}$$

- 1. Ordnung der Korrelationsentwicklung führt zur Renormierung des äußeren Feldes

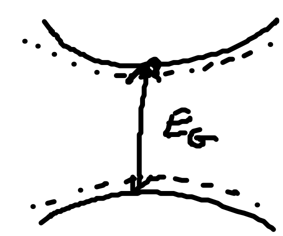
Coulomb Enhancement

$$\frac{\partial}{\partial t} p^* \Big|_{H_{ii}} = \frac{i}{\hbar} \Sigma_p(k)\, p^*(k) + \frac{i}{\hbar} \Delta p^*(k) (1 - f_e - f_h)$$

Coulomb enhancement

$$\Sigma_p^{ii}(k) = -\sum_q \left\{ (M_e(q) - M_h(q)) (p^*(k+q) + p(k+q)) \right\}$$

Selbstenergie, die Übergangsfrequenz renormiert



<u>2. Ordnung</u>:

1. zusätzliche DGL für 2 Teilchen Streuamplituden (Kommutator berechnen)
2. Faktorisierung der höheren Streuamplituden zum Abbruch der Gleichungshierarchie
3. Formale Integration der zusätzlichen DGL (genau wie 4.4.4. zur Eliminierung der Reservoir Variablen)

→ Quantenkinetische Gleichungen

d.h. Stoßterme führen zu nicht-Markov Generationsraten

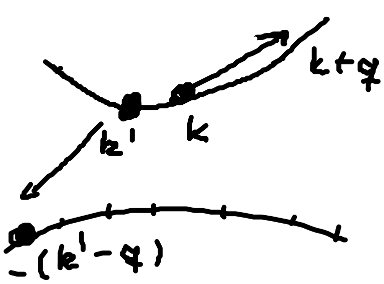
d.h. Energie-Zeit Unschärfe erlaubt Verletzung der Energieerhaltung (für kleine t)

Markov Näherung: Vernachlässigung von Gedächtniseffekten

→ Stoßterm gegeben durch Übergangswahrsch. analog zu Fermi's Goldener Regel

Ergebnis von ①, ②, ③ und Markov:

$$\left.\frac{\partial}{\partial t} f^e(k)\right|_{\hat{H}_{ii}} \approx \frac{2\pi}{\hbar} \sum_{k'q} |M_c(q)|^2 \, \delta(\alpha) \, f_e(k) f_e(k') (1 - f_e(k+q)) (1 - f_h(k'-q))$$



$$\alpha = -E_c(k+q) - E_v(k'-q) + E_c(k') + E_c(k)$$

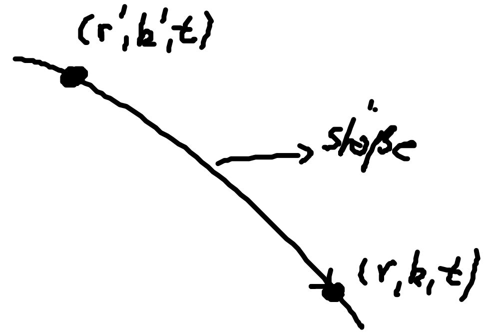
→ Kinetische Gleichung für Besetzungsfunktion $f_e(k)$, $p(k)$

Boltzmann Gleichung für Stoßprozesse

5.2. Boltzmanngleichung mit Ortsabhängigkeit

- Die Zahl der Elektronen $f(\underline{r},\underline{k},t)\,d^3r\,d^3k$ im Phasenraumvolumen $d^3r\,d^3k$ ändert sich im Zeitintervall dt durch

(i) Ortsänderung



Bewegung $\quad \dot{\underline{r}} = v_g$

$$t' = t - dt$$
$$\underline{r}' = \underline{r} - \dot{\underline{r}}\,dt$$

(ii) Quasiimpulsänderung (Beschleunigung durch el. Feld)

$$\hbar \dot{\underline{k}} = -e\underline{\mathcal{E}}$$
$$\underline{a} = \dot{\underline{v}}_g$$

$$\underline{k}' = \underline{k} - \dot{\underline{k}}\,dt$$

(iii) Stöße (Streuprozesse)

$$f(\underline{r},\underline{k},t) = f(\underline{r}',\underline{k}',t') + \left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{\text{Stoß}} dt$$
$$= f(\underline{r} - \dot{\underline{r}}\,dt,\ \underline{k} - \dot{\underline{k}}\,dt,\ t - dt) + \left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{\text{Stoß}} dt$$

Taylorentwicklg bis $O(dt)$

$$= f(\underline{r},\underline{k},t) - \left[\underline{\dot{r}}\,\nabla_r f(\underline{r},\underline{k},t) + \underline{\dot{k}}\,\nabla_k f(r,k,t) + \frac{\partial f}{\partial t}\Big|_{r,k,t}\right] dt + \left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{\text{Stoß}} dt$$

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \underline{\dot{r}}\,\nabla_r f + \underline{\dot{k}}\,\nabla_k f = \frac{d}{dt} f(r,k,t)$$

Ableitung im mitbewegten Koordinatensystem

$$\boxed{\frac{\partial f}{\partial t} + \underline{v}_g \nabla_r f + \frac{-e\mathcal{E}}{\hbar} \nabla_k f(r,k,t) = \left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{\text{Stoß}}}$$

$$\underline{v}_g(k) = \frac{1}{\hbar} \nabla_k E(k)$$

Bandstruktur

Boltzmanngleichung : - enthält Bandstruktur

- Streumechanismen

"semiklassische" Transportgleichung

Stoßterm: sei $W(k,k')$ die Wahrscheinlichkeit pro Zeit, das Elektron von $k \to k'$ gestreut wird

$$\left(\frac{\partial f(r,k,t)}{\partial t}\right)_{out} = -\sum_{\underline{k}'} W(k,k')\, f(r,\underline{k},t)\left(1-f(\underline{r},\underline{k}',t)\right)$$

$$\left(\frac{\partial f(r,k,t)}{\partial t}\right)_{in} = \sum_{\underline{k}'} W(k',k)\, f(\underline{r},\underline{k}',t)\left[1-f(\underline{r},\underline{k},t)\right]$$

Quantenmechanisch ist W für beide Richtungen gleich

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{stoß} = -\sum_{k'} W(k,k') f(k)(1-f(k')) + \sum_{k'} W(k',k) f(k')(1-f(k))$$

Ersetzen der Summe $\sum_k$ durch Integration $\frac{1}{(2\pi)^3}\int d^3k'$

Nichtlineare Integro-Differentialgleichung für Elektronenverteilung

$$\boxed{\begin{aligned}&\frac{\partial f(r,k,t)}{\partial t} + v_g(k)\,\underline{\nabla}_r f(\underline{v},\underline{k},t) + \frac{-e\mathcal{E}}{\hbar}\underline{\nabla}_k f(r,k,t)\\ &= \frac{-V}{(2\pi)^3}\int\left\{W(k,k') f(r,k,t)\left[1-f(r,k',t)\right] - W(k',k) f(r,k',t)(1-f(r,k,t))\right\} d^3k'\end{aligned}}$$

Näherungsannahmen in Boltzmanngleichung

(i) Wechselwirkungen und Korrelationen der Teilchen sind klein
→ Ein-Elektronen Näherung

(ii) Verteilungsfunktion ändert sich nur auf Längenskala größer als Ausdehnung der Wellenpakete

(iii) Die Zeit zwischen 2 Stößen ist groß gegen die Dauer eines Stoßes
→ punktförmige Stöße

(iv) Dichte der Ladungsträger niedrig
→ nur Zweierstöße berücksichtigt

(v) Räumliche und zeitliche Änderung der angelegten Felder E klein bezogen auf Stoßlänge und Stoßzeit