

## English Summary:

### 4.3 Semiconductor Bloch equations

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_{\text{opt}} = \sum_{\mathbf{k}} E_c(\mathbf{k}) a_{\mathbf{k}}^{\dagger} a_{\mathbf{k}} - \sum_{\mathbf{k}} E_v(\mathbf{k}) d_{\mathbf{k}}^{\dagger} d_{\mathbf{k}} + \sum_{\mathbf{k}} \mu \cdot \mathbf{E}(\mathbf{k}) (a_{\mathbf{k}}^{\dagger} d_{\mathbf{k}}^{\dagger} + d_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}})$$

$$\frac{d}{dt} f_c(\mathbf{k}, t) = \frac{1}{i} \Omega_p (p^*(\mathbf{k}, t) - p(\mathbf{k}, t)) = \frac{d}{dt} f_h(\mathbf{k}, t)$$

$$\frac{d}{dt} p(\mathbf{k}, t) = \frac{1}{i} \omega_p(\mathbf{k}) p(\mathbf{k}, t) + \frac{1}{i} \Omega_p (1 - f_c - f_h)$$

-inversion

dist. fct of el  $f_c(\mathbf{k}) = \langle a_{\mathbf{k}}^{\dagger} a_{\mathbf{k}} \rangle$

" " of holes  $f_h(\mathbf{k}) = \langle d_{\mathbf{k}}^{\dagger} d_{\mathbf{k}} \rangle$

micr. polarization  $p(\mathbf{k}) = \langle d_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}} \rangle$

$p^*(\mathbf{k}) = \langle a_{\mathbf{k}}^{\dagger} d_{\mathbf{k}}^{\dagger} \rangle$

optical transition frequ.  $\omega_p = \frac{1}{\hbar} (E_c(\mathbf{k}) - E_v(\mathbf{k}))$

Rabi frequ.  $\Omega_p = \frac{\mu \cdot \mathbf{E}}{\hbar}$ ,  $\mu$  el. dipole moment

(ii) Beziehung von  $\hat{H}_{ee} = \hat{H}_{\mathbf{E}-\mathbf{E}} + \hat{H}_{\mathbf{D}-\mathbf{D}} + \hat{H}_{\mathbf{E}-\mathbf{D}}$

$$[\hat{H}_{\mathbf{E}-\mathbf{E}}, a_{\mathbf{L}}^{\dagger} a_{\mathbf{R}}] = \dots = \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{q}} \frac{V(\mathbf{q})}{2} \{ -a_{\mathbf{k}}^{\dagger} a_{\mathbf{L}-\mathbf{q}}^{\dagger} a_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} a_{\mathbf{R}} + a_{\mathbf{R}}^{\dagger} a_{\mathbf{k}}^{\dagger} a_{\mathbf{L}+\mathbf{q}} a_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} \}$$

$\langle [\hat{H}_{\mathbf{E}-\mathbf{E}}, a_{\mathbf{L}}^{\dagger} a_{\mathbf{R}}] \rangle$  enthält 2-Teilchen-Korrelationen  $y^{ee} = \langle a_{\mathbf{k}}^{\dagger} a_{\mathbf{L}-\mathbf{q}}^{\dagger} a_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} a_{\mathbf{R}} \rangle$   
(e-e-Strukturanphindeln)

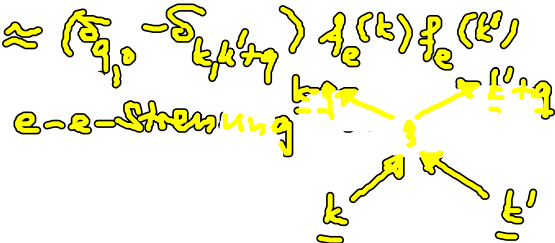
Problem: Zeitentwicklung von  $y^{ee}$  müsste durch zusätzl. Gln. beschrieben werden

⇒ Ankopplung an noch höhere Korrelationsstufen

⇒ unendl. Hierarchie von Gln. für n-Teilchen-Korrelationen

⇒ Abbruch

$$\text{z.B. } y^{ee} = \langle a_{\mathbf{L}-\mathbf{q}}^{\dagger} a_{\mathbf{L}+\mathbf{q}}^{\dagger} a_{\mathbf{L}} a_{\mathbf{R}} \rangle \approx \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{q}} \langle a_{\mathbf{k}}^{\dagger} a_{\mathbf{k}} \rangle \langle a_{\mathbf{L}}^{\dagger} a_{\mathbf{L}} \rangle + \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{q}} \langle a_{\mathbf{k}}^{\dagger} a_{\mathbf{L}} \rangle \langle a_{\mathbf{L}}^{\dagger} a_{\mathbf{k}} \rangle$$



⇒ qz System schließt.

### 4.4. Gleichgewichtstatistik: Das ideale Fermigas

bisher: Nichtgleichgewichtszustände  
 Zeitents. des statist. Op.  $\hat{\rho}$  durch  
 Liouville- oder Neumann-Gl.

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

jetzt: thermodyn. Gleichgewicht (zeitunabh.)  
 geg. durch Jaynes'sches Prinzip der  
 vorurteilsfreien Schätzung:

Minimum der Shannon-Information

$\mathcal{I}(\hat{\rho}) = \text{tr}(\hat{\rho} \ln \hat{\rho})$  unter Nebenbed.

$\text{tr} \hat{\rho} = 1$  (Normierung)  $\Rightarrow \gamma$   
 $\text{tr}(\hat{\rho} \hat{M}^\nu) = \langle M^\nu \rangle$  (Makroobs.)  $\Rightarrow \lambda_\nu$  } Lagrange-  
 Par.

⇒  $\hat{\rho} = e^{\gamma - \lambda_\nu \hat{M}^\nu} = Z^{-1} e^{-\lambda_\nu \hat{M}^\nu}$

(Zustandssumme  $Z \equiv e^{-\gamma} \equiv \text{tr} e^{-\lambda_\nu \hat{M}^\nu}$ )

z.B. kanon. statist. Op.  $\hat{\rho} = Z^{-1} e^{-\beta \hat{H}}$

großkanon. statist. Op.  $\hat{\rho} = \Xi^{-1} e^{-\beta(\hat{H} - \mu \hat{N})}$   $\beta = \frac{1}{kT}$   
 $\mu$  chem. Pot.

Ideales Gas (NW-freie, identische Fermionen):

$\hat{H} = \sum_k \epsilon_k \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_k = \sum_k \epsilon_k \hat{N}_k$   $N_k = 0, 1$  Besetzungszahl  
 ↳ Einzelchenenergie

Wahrscheinl., das System im Vielteilchenzust.  $|\alpha\rangle$  zu finden:

$P_\alpha = \langle \alpha | \hat{\rho} | \alpha \rangle = \Xi^{-1} \exp \left\{ -\beta \sum_{j=1}^L (\epsilon_j - \mu) N_j \right\}$

großkanon. Zustandssumme

$$\Xi = \sum_{N_1 \dots N_L} \exp \left\{ -\beta \sum_{j=1}^L (E_j - \mu) N_j \right\}$$

$$= \prod_{j=1}^L \left[ \sum_{N_j} \exp \left\{ -\beta (E_j - \mu) N_j \right\} \right]$$

Fermionen

$$= \prod_{j=1}^L \left[ \sum_{N_j=0}^1 t_j^{N_j} \right] \quad \text{mit } t_j := \exp \beta (\mu - E_j)$$

$$= \prod_{j=1}^L [1 + t_j] = \prod_{j=1}^L \Xi_j$$

$$\Rightarrow P(N_1 \dots N_L) = \prod_{j=1}^L \frac{t_j^{N_j}}{1 + t_j} = \prod_{j=1}^L p(N_j) \quad \text{separiert}$$

W., das System mit der Besetzung  $N_1, N_2, \dots$  zu finden

Mittlere Besetzungszahl im 1-Teilchen-Zustand  $E_j$ :

Aus  $p(N_j) = \exp(\varphi_j - \beta E_j - \alpha N_j)$

$$\alpha = -\beta \mu$$

$$\varphi_j = -\ln \Xi_j = -\ln(1 + t_j)$$

$$\langle N_j \rangle = \frac{\partial \varphi_j}{\partial \alpha} = \frac{1}{\beta} \frac{\partial}{\partial \mu} \ln \Xi_j = \frac{t_j}{1 + t_j} = \frac{1}{t_j^{-1} + 1}$$

$$\langle N_j \rangle = \frac{1}{\exp \left[ \frac{E_j - \mu}{kT} \right] + 1}$$

Fermi-Verteilung

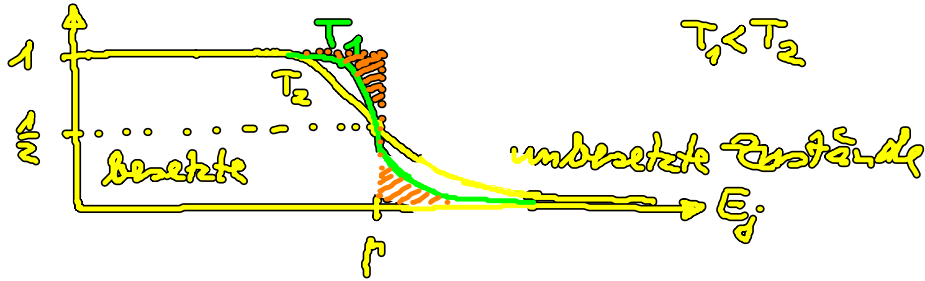
(folgt auch explizit aus  $\langle N_j \rangle = \sum_{N_j=0}^1 \sum_{N_2=0}^1 \dots \left\{ N_j \frac{t_j^{N_1}}{1+t_j} \dots \frac{t_j^{N_i}}{1+t_j} \dots \right\}$ )

$$= \sum_{N_j=0}^1 N_j \frac{t_j^{N_j}}{1+t_j} = \frac{0 + 1 \cdot t_j}{1+t_j}$$

oder speziell wegen  $N_j = 0, 1$  aus  $\langle N_j \rangle = p(N_j=1) = \frac{t_j}{1+t_j}$

gilt nicht für Bose!

$$\langle N_j \rangle$$



$T \rightarrow 0$  :  $\langle N_j \rangle \rightarrow \Theta(\mu - E_j)$  Stufenfkt.  
(Quantenlinien)

$T > 0$  : „Aufweichungszone“ des  $E_j = \mu$  der Breite  $\approx kT$

$$E_j - \mu \gg kT \text{ (hohe Energie)} : \langle N_j \rangle \approx \exp\left[-\frac{E_j - \mu}{kT}\right]$$

klas. Grenzfall

(Maxwell-Boltzmann-Verteil.)

gesamte mittlere Teilchenzahl  $\bar{N} = \sum_{j=1}^{\ell} \langle N_j \rangle$

Anwendung auf Halbleiter :  $\mu = E_F$  Fermi-Niveau

Bestimmung des Fermi-Niveaus aus der Ladungsneutralität, z.B.  $n = p$  (intrinsisch)  $\Rightarrow E_F$   
( $\ominus$  dichte = Lochdichte)

Verallgemeinerung auf Quasi-Gleichgewicht

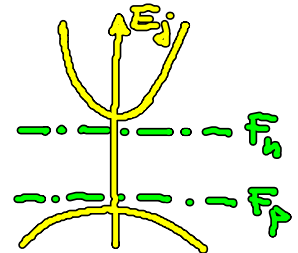
(d.h. Elektronen im Leitungsband untereinander im thermodyn. Gleichgewicht, aber nicht mit den Löchern im Valenzband u. ggf. weiteren Ladungsträger-Erzeugern)

$\Rightarrow$  quasi-Fermi-Niveaus der Elektronen  $F_n$   
quasi-Fermi-Niveaus der Löcher  $F_p$

$$F_n \neq F_p$$

$F_n$  bestimmt durch  $n$  :  $n = \frac{1}{V} \sum_{j=1}^{\ell} \frac{1}{\exp\left(\frac{E_j - F_n}{kT}\right) + 1}$

$F_p$  bestimmt durch  $p$  :  $p = \frac{1}{V} \sum_{j=1}^{\ell} \frac{1}{\exp\left(\frac{F_p - E_j}{kT}\right) + 1}$



Thermische Zustandsgl.

(Druck  $p$ )  $pV = kT \ln \Xi = kT \sum_{j=1}^{\ell} \ln \Xi_j = kT \sum_{j=1}^{\ell} \ln [1 + \exp\beta(\mu - E_j)]$

## Energie u. Zustandsdichte freier Teilchen

Energie-Eigenwerte  $E_k = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$   $k$  Wellenvektor

System sei in Würfel  $V = L^3$  eingeschlossen.

Zykl. Randbed. (Born-v. Karman):

$$\psi_j(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} \quad k_\alpha L = 2\pi n_\alpha, \quad n_\alpha = \pm 1, \pm 2, \dots$$

( $\alpha = 1, 2, 3$ )

1 Zustand im  $k$ -Raum bespricht das „Volumen“

$$(\Delta k)^3 = \left(\frac{2\pi}{L}\right)^3 = \frac{(2\pi)^3}{V} \quad (\text{ohne Spin!})$$

Im thermodyn. Limes (großes  $V$ ):

Übergang zum Quasikontinuum  $\sum_j \rightarrow \frac{V}{(2\pi)^3} \int d^3k$

$$\boxed{\sum_j \rightarrow \frac{V}{h^3} \int d^3p} \quad \text{mit } \underline{p} = \hbar \underline{k}$$

Spin entartung (Spin  $\frac{1}{2}$ ):  $(2S+1)$ -fach

Kugelsymmet. Integral:

$$\sum_j \rightarrow (2S+1) \frac{V}{h^3} \int_0^\infty 4\pi p^2 dp$$