VIII. Elektronischer Transport

VIII.1 Ladungsträgerdichte, Stromdichte, Wignerfunktion

Ein wichtiges Gebiet im Festkörper ist der Transport von Ladungsträgern.

Erster Schritt um das Problem anzugehen ist die Beschreibung in der 2. Quantisierung.

Was brauchen wir? Kontinuitätsgl.: ρ und j!

Ladungsdichte

(Beispiel für 1 Band von Elektronen im Volumen Halbleiter)

$$\rho(\underline{r}) = e\,\Psi^{+}(\underline{r})\,\Psi(\underline{r}) = e \sum_{\substack{k k' \\ \lambda \lambda'}} \frac{1}{V}\, a^{+}_{\lambda k}\, a_{\lambda k'}\, e^{-i(\underline{k}-\underline{k}')\cdot\underline{r}}\, u^{*}_{\lambda k}(\underline{r})\, u_{\lambda' k'}(\underline{r})$$

Schauen wir uns die Dynamik von $\langle\rho(\underline{r})\rangle$ an, so brauchen wir die Bewegungsgl. für $\langle a^{+}_{\lambda k}\, a_{\lambda k'}\rangle$!

Stromdichte

$$\underline{j}(\underline{r}) = \frac{1}{2}\frac{e}{m}\left(\Psi^{+}(\underline{r})\underbrace{(\underline{p} - e\underline{A})}_{\substack{\text{Geschwindigkeits} \\ \text{-operator}}}\Psi(\underline{r}) + h.c.\right)$$

Wieder Überführung in Größen mit a^{+}, a

$$= \sum_{\substack{kk' \\ \lambda\lambda'}} \frac{1}{2} \frac{e}{m} \underbrace{\left(e^{-i(\underline{k}\cdot\underline{r})} u^{*}_{\lambda k}(\underline{r}) (\underline{p} - e\underline{A}) u_{\lambda' k'}(\underline{r}) e^{i(\underline{k}'\cdot\underline{r})} a^{\dagger}_{\lambda k} a_{\lambda' k'} + \text{h.c.} \right)}_{}$$

Verschiedene Beiträge

a) $\lambda \neq \lambda'$ interband Beiträge (Optik)

b) $\lambda = \lambda'$ intraband Beiträge (Transport)

In der Übungsaufgabe wird gezeigt:

$$\frac{1}{\Omega} \int_{\Omega} d^3r \; u^{*}_{\lambda k}(\underline{r}) \frac{\underline{p}}{m_0} u_{\lambda' k}(\underline{r}) = \begin{cases} -\frac{\hbar \underline{k}}{m_0} + \nabla_k \frac{\varepsilon_{\lambda k}}{\hbar} & \lambda = \lambda' \\ i(\omega_{\lambda k} - \omega_{\lambda' k})\, d_{\lambda\lambda'} & \lambda \neq \lambda' \end{cases}$$

mit dem Dipolmoment $d_{\lambda\lambda'} = \frac{1}{\Omega} \int_{\Omega} d^3r \; u^{*}_{\lambda_1 k=0}(\underline{r}) \, \underline{r} \, u_{\lambda_2 \underline{k}}(\underline{r})$

$$\omega_{\lambda k} = \frac{\varepsilon_{\lambda k=0}}{\hbar}$$

Fall $\lambda = \lambda'$

Beitrag zu $\underline{j}$ für $\lambda = \lambda'$: (Mittelung über Zelle)

$$\sum_{kk'} \frac{1}{2} \frac{e}{m} e^{-i(\underline{k}\cdot\underline{r})} \left(\nabla_k \frac{\varepsilon_{\lambda k}}{\hbar} - e\underline{A} \right) e^{i(\underline{k}'\cdot\underline{r})} a^{\dagger}_{\lambda k} a_{\lambda k'}$$

Wichtig ist

$\langle a^{\dagger}_{\lambda k} \, a_{\lambda' k'} \rangle$, die Größe, die wir berechnen!

Vor der Berechnung von $\langle a^{\dagger} a \rangle$, sehen wir uns die Wigner Verteilung!

Erinnerung an die klassische Statistik:

Dort gab es eine Verteilungsfunktion $g(q, p)$ (mit q Ort und p kanonischer Impuls)

Lösung ist die Wignerverteilung, das Quantenanalogon zur Verteilungsfkt

$$\underbrace{f_k(\underline{r},t)}_{\substack{\text{Quasi-Wahrscheinlichkeit,}\\ \text{dass Elektron mit}\\ \text{Impuls } \hbar k \text{ am Ort } x \text{ ist}\\ \text{(kann negativ sein!}\\ \text{QM Größe!)}}} = \int_V \langle \psi^+(\underline{r}+\underline{y})\,\psi(\underline{r}-\underline{y})\rangle\, e^{2i\underline{k}\cdot\underline{y}}\, d\underline{y}$$

$$\underset{\substack{\uparrow\\ \text{Beispiel}\\ \text{freier}\\ \text{Basis}\\ \text{ohne Potential}}}{=} \int_V \sum_{\tilde{\underline{k}}\tilde{\underline{k}}'} \frac{e^{-i\tilde{\underline{k}}\cdot(\underline{r}+\underline{y})}}{V} \langle a^+_{\lambda\tilde{\underline{k}}}\, a_{\lambda\tilde{\underline{k}}'}\rangle e^{i\tilde{\underline{k}}'(\underline{r}-\underline{y})+2i\underline{k}\cdot\underline{y}}\, d\underline{y}$$

$$= \sum_{\tilde{\underline{k}}\tilde{\underline{k}}'} \frac{e^{i(\tilde{\underline{k}}'-\tilde{\underline{k}})\cdot\underline{r}}}{V} \langle a^+_{\lambda\tilde{\underline{k}}}\, a_{\lambda\tilde{\underline{k}}'}\rangle \underbrace{\int d\underline{y}\, e^{i(2\underline{k}-\tilde{\underline{k}}'+\tilde{\underline{k}})\underline{y}}}_{\underbrace{(2\pi)^3\,\delta(2\underline{k}-\tilde{\underline{k}}'+\tilde{\underline{k}})}_{V\,\delta_{2\underline{k},\tilde{\underline{k}}'+\tilde{\underline{k}}}}}$$

$$\tilde{\underline{k}} = 2\underline{k}-\tilde{\underline{k}}'$$

$$= \sum_{\tilde{\underline{k}}'} e^{i(2\tilde{\underline{k}}'-2\underline{k})\cdot\underline{r}} \langle a^+_{\lambda 2\underline{k}-\tilde{\underline{k}}'}\, a_{\lambda\tilde{\underline{k}}'}\rangle$$

$$\tilde{\underline{k}}' \to \tfrac{1}{2}\tilde{\underline{k}}' + \underline{k}$$

$$\Big\|\; f_k(\underline{r},t) = \sum_{k'} e^{i\underline{k}'\cdot\underline{r}} \langle a^+_{\lambda\underline{k}-\frac{1}{2}\underline{k}'}\, a_{\lambda\underline{k}+\frac{1}{2}\underline{k}'}\rangle \;\Big\|$$

Die Wignerverteilung hat interessante Eigenschaften:

(a) $$\Big\|\; f_k = \frac{1}{V}\int d\underline{r}\, f_k(\underline{r},t) \;\Big\|$$

<u>Bew:</u>

$$f_k = \frac{1}{V}\int d\underline{r} \sum_{k'} e^{i\underline{k}'\cdot\underline{r}} \langle a^+_{\lambda\underline{k}-\frac{1}{2}\underline{k}'}\, a_{\lambda\underline{k}+\frac{1}{2}\underline{k}'}\rangle$$

$$= \sum_{k'} \delta_{k',0} \langle a^+_{\lambda k-\frac{1}{2}k'}\, a_{\lambda k+\frac{1}{2}k'}\rangle$$

$$= \langle a^+_{\lambda k}\, a_{\lambda k}\rangle = f_k$$

(b) $$\Big\|\; n(\underline{r}) = \sum_k f_k(\underline{r},t) \;\Big\|$$

<u>Beweis:</u> $$n(\underline{r}) = \sum_k \sum_{k'} e^{i\underline{k}'\cdot\underline{r}} \langle a^+_{\lambda k-\frac{1}{2}\underline{k}'}\, a_{\lambda\underline{k}+\frac{1}{2}\underline{k}'}\rangle$$

$$= \sum_k \sum_{k'} e^{-i\underline{k}\cdot\underline{r} + i\left(\frac{\underline{k}'}{2}\right)\underline{r}} \; e^{i\underline{k}\cdot\underline{r} + i\frac{\underline{k}'}{2}\underline{r}} \langle a^+_{\lambda\underline{k}-\frac{1}{2}\underline{k}'} a_{\lambda\underline{k}+\frac{1}{2}\underline{k}'}\rangle$$

$$= \langle \psi^+(\underline{r},t)\, \psi(\underline{r},t)\rangle \quad \text{qed.}$$

(c) Man kann über die Wignerverteilung Rückschlüsse in den Eigenschaften der Elektronenverteilung ziehen:

z. B. räumlich homogenes System (gilt es auch bei Strom)

$$\sum_{k'} e^{i\underline{k}'\cdot\underline{r}'} \langle a^+_{\underline{k}-\frac{1}{2}\underline{k}'} a_{\underline{k}+\frac{1}{2}\underline{k}'}\rangle = f_k(\underline{r}',t) \overset{!}{=} f_k(\underline{r},t) = \sum_{k'} e^{i\underline{k}'\cdot\underline{r}} \langle a^+_{\lambda\underline{k}-\frac{1}{2}\underline{k}'} a_{\lambda\underline{k}+\frac{1}{2}\underline{k}'}\rangle$$

$$\sum_{k'} \left(e^{i\underline{k}'\cdot\underline{r}'} - e^{i\underline{k}'\cdot\underline{r}}\right) \langle a^+_{\lambda k-\frac{1}{2}k'} a_{k+\frac{1}{2}k'}\rangle = 0$$

$$\Rightarrow \langle a^+_{\lambda k-\frac{1}{2}k'} a_{k+\frac{1}{2}k'}\rangle \propto \delta_{k',0}$$

Also bei räumlicher Homogenität muss

$$\langle a^+_{\lambda k} a_{\lambda k'}\rangle = \delta_{kk'} \langle a^+_{\lambda k} a_{\lambda k}\rangle$$

sein!

<u>Ziel</u>: (i) Bei räumlicher Homogenität Transportgleichung unter Einfluss von externem Feld und Streuung für $\langle a^+_{\lambda k} a_{\lambda k}\rangle$

[(ii) Allgemeine Gleichung für $f_k(r)$ Boltzmanngleichung (nicht hier)]

Zutaten:

Streumechanismus: z.B. Elektron-Phonon Streuung

Elektron E-Feld Kopplung

Beitrag zur Bewegungsgl. von $a^\dagger_k a_k$

Streugleichung

VIII.2 Phononstreuung elektronischer Dichten

Wir sehen uns den Einfluss der Phononen in einem Ein Band System an:

Hamiltonian

$$H_0 = \hbar \sum_k \xi_k a^\dagger_k a_k + \sum_q \hbar \omega_q b^\dagger_q b_q$$

$$H_{el-ph} = \hbar \sum_{kq} a^\dagger_{k+q} a_k \left(D_q b^\dagger_q + D^*_q b_q \right)$$

Bewegungsgl. über die Heisenberg Bewegungsgl. (ähnlich wie im Elektron-Elektron Teil)
$\frac{d}{dt}A = \frac{i}{\hbar}[H,A]$

$$\partial_t \langle a^\dagger_k a_k \rangle \Big|_{H_0} = 0 \qquad \text{für Dichten}$$

$$\partial_t \langle a^\dagger_k a_k \rangle \Big|_{H_{el-ph}} = i \sum_q \Big[D_q \langle b^\dagger_q a^\dagger_{k+q} a_k \rangle + D^*_q \langle b_q a^\dagger_{k+q} a_k \rangle - D_q \langle b^\dagger_q a^\dagger_k a_{k-q} \rangle + D^*_q \langle b_q a^\dagger_k a_{k-q} \rangle \Big)$$

Bewegungsgl. für assistierte Größen aufstellen:

$$\partial_t \langle b_q^\dagger a_{k+q}^\dagger a_k\rangle = i(\varepsilon_{k+q}-\varepsilon_k+\omega_q)\langle b_q^\dagger a_{k+q}^\dagger a_k\rangle$$
$$+ i\sum_{\tilde q} D_{\tilde q}^* \langle a^\dagger_{k+q+\tilde q} a_k\rangle - i\sum_{\tilde k \tilde q} D^*_{\tilde q}\langle a^\dagger_{\tilde k+\tilde q} a^\dagger_{k+q} a_{\tilde k} a_k\rangle$$
$$+ i\sum_{\tilde q} D_{\tilde q}\langle b_q^\dagger b_{\tilde q}^\dagger a^\dagger_{k+q+\tilde q} a_k\rangle - i\sum_{\tilde q} D_{\tilde q}\langle b_q^\dagger b_{\tilde q}^\dagger a^\dagger_{k+q} a_{k-\tilde q}\rangle$$
$$+ i\sum_{\tilde q} D^*_{\tilde q}\langle b_q^\dagger b_{\tilde q} a^\dagger_{k+q+\tilde q} a_k\rangle - i\sum_{\tilde q} D^*_{\tilde q}\langle b_q^\dagger b_{\tilde q} a^\dagger_{k+q} a_{k-\tilde q}\rangle$$

Folgende Näherungen

1) Zweite Ordnung Born $\langle b_1^{(\dagger)} b_2^{(\dagger)} a_3^\dagger a_4\rangle \simeq \langle b_1^{(\dagger)} b_2^{(\dagger)}\rangle\langle a_3^\dagger a_4\rangle$

2) Homogenitätsannahme $\langle a^\dagger_{k_1} a_{k_2}\rangle = \delta_{k_1 k_2}\langle a^\dagger_{k_1} a_{k_1}\rangle$

3) Badannahme $\langle b^\dagger b^\dagger\rangle = \langle bb\rangle = 0$

sowie $\langle b^\dagger_{q_1} b_{q_2}\rangle = \delta_{q_1 q_2}\langle b^\dagger_{q_1} b_{q_1}\rangle$

4) Hartree Fock

$$\langle a_1^\dagger a_2^\dagger a_3 a_4\rangle = \langle a_1^\dagger a_4\rangle\langle a_2^\dagger a_3\rangle - \langle a_1^\dagger a_3\rangle\langle a_2^\dagger a_4\rangle$$

$$\partial_t\langle b_q^\dagger a^\dagger_{k+q} a_k\rangle = i(\varepsilon_{k+q}-\varepsilon_k+\omega_q)\langle b_q^\dagger a^\dagger_{k+q} a_k\rangle$$
$$+ iD^*_{-q}\langle a_k^\dagger a_k\rangle(1-\langle a^\dagger_{k+q}a_{k+q}\rangle)$$
$$+ iD^*_{-q}\langle b_q^\dagger b_q\rangle\underbrace{(\langle a_k^\dagger a_k\rangle - \langle a^\dagger_{k+q} a_{k+q}\rangle)}_{-\sigma_k\sigma_{k+q}+\sigma_k\sigma_{k+q}}$$

mit $\sigma_k = \langle a_k^\dagger a_k\rangle$

$$\partial_t\langle b_q^\dagger a^\dagger_{k+q} a_k\rangle = i(\varepsilon_{k+q}-\varepsilon_k+\omega_q)\langle b_q^\dagger a^\dagger_{k+q} a_k\rangle \tag{A}$$
$$+ iD_q^*\,\sigma_k(1-\sigma_{k+q})(1+n_q)$$
$$- iD_q^*\,\sigma_{k+q}(1-\sigma_k)\,n_q$$

Analog für die komplex konjugierte Seite:

$$\partial_t\langle b_q a_k^\dagger a_{k+q}\rangle = i(\varepsilon_k-\varepsilon_{k+q}-\omega_q)\langle b_q a_k^\dagger a_{k+q}\rangle \tag{B}$$

$$+\, i\, D_q^* \;\sigma_{k+q}(1-\sigma_k)\, n_q$$

$$-\, i\, D_q^* \;\sigma_k\,(1-\sigma_k)\,(1+n_q)$$

Nächster Schritt, wir wollen eine Gleichung für σ_k!

$\Rightarrow$ Lösung der Gleichung in Markovnäherung

Vernachlässigung von Gedächtniseffekten

Formale Lösung der Gleichung

$$\langle b_q\, a_k^\dagger a_{k+q}\rangle(t) = i D_q \int_{-\infty}^{t} dt' \underbrace{e^{i(\varepsilon_{k+q}-\varepsilon_q+\omega_q)(t-t')}}_{\substack{\text{Grundlösung}\\ \text{des homogenen}\\ \text{Problems}\\ \text{Schnelle Oszillation}}} \underbrace{\big(\sigma_k(t')(1-\sigma_{k+q}(t'))(1+n_q) - \sigma_{k+q}(t')(1-\sigma_k(t'))\,n_q\big)}_{\text{Langsam veränderliche Größe}}$$

Tipp: Schnell veränderliche Größe

$$A(t) = \underbrace{\tilde{A}(t)}_{\text{langsam}}\; \underbrace{e^{i\omega_s t}}_{\text{schnell}}$$

Markovnäherung!

$$= i D_q \big(\sigma_k(t)(1-\sigma_{k+q}(t))(1+n_q) - \sigma_{k+q}(t)(1-\sigma_k(t))\,n_q(t)\big) \underbrace{\underbrace{\int_{-\infty}^{t} dt'\, e^{i(\varepsilon_{k+q}-\varepsilon_q+\omega_q)(t-t')}}_{s=t-t'\qquad \int_0^\infty ds\; e^{i(\varepsilon_{k+q}-\varepsilon_k+\omega_q)s}}}_{\frac{1}{2}(2\pi)\;\delta(\varepsilon_{k+q}-\varepsilon_q+\omega_q)}$$

Energieerhaltung

$$\langle b_q\, a_k^\dagger\, a_{k+q}\rangle = \pi\, i\, D_q\, \delta(\varepsilon_{k+q}-\varepsilon_q+\omega_q)\big(\sigma_k(t)(1-\sigma_{k+q}(t))(1+n_q) - \sigma_{k+q}(t)(1-\sigma_k(t))\,n_q\big)$$

analog

$$\langle b_q^\dagger\, a_{k+q}^\dagger\, a_k\rangle = \pi\, i\, D_q^*\, \delta(\varepsilon_k - \varepsilon_{k+q}-\omega_q)\big(\sigma_k(1-\sigma_{k+q})\,n_q$$

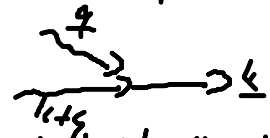
$- \sigma_{k+q}(1-\sigma_k)(1+n_q)$

Jetzt wird die Ergebnis wieder in der Gleichung für σ_k eingesetzt.

Einsetzen ergibt

$$\partial_t \sigma_k \Big|_{el-p} = + \sum_q 2\pi |D_q|^2 \delta(\varepsilon_k - \varepsilon_{k+q} - \omega_q) \Big[\underbrace{\sigma_{k+q}(1-\sigma_k) n_q}_{\text{Einstreuterm} \propto \sigma_{k+q}} - \underbrace{\sigma_k (1-\sigma_{k+q})(1+n_q)}_{\text{Ausstreuterm} \propto \sigma_k} \Big]$$

$\varepsilon_k > \varepsilon_{k+q}$

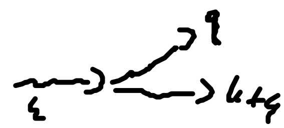


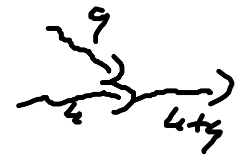
indizierte Absorption

spontan + induzierte Emission

$$+ \sum_q 2\pi |D_q|^2 \delta(\varepsilon_k - \varepsilon_{k+q} + \omega_q) \big(\sigma_{k+q}(1-\sigma_k)(1+n_q) - \sigma_k (1-\sigma_{k+q}) n_q \big)$$

$\varepsilon_k < \varepsilon_{k+q}$





Umschreibung

$$\partial_t \sigma_k = \underbrace{\Gamma_{k+q \to k}\, \sigma_{k+q}}_{\text{Einstreuterm}} - \underbrace{\Gamma_{k \to k+q}\, \sigma_k}_{\text{Ausstreuterm}}$$