

4.2.2. Elektron-Feld WW Operator

$$\hat{H}_{\text{opt}} = - \int d^3r \psi^\dagger(\mathbf{r}, t) e \underline{\epsilon} \underline{E}(\mathbf{r}, t) \psi(\mathbf{r}, t)$$

Fouriertrafo $\underline{E}(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{q}} e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}} \underline{E}(\mathbf{q}, t)$

$$\Rightarrow \hat{H}_{\text{opt}} = \frac{1}{V} \sum_{\substack{\mathbf{k}, \mathbf{q} \\ n, n'}} \underline{E}(\mathbf{q}, t) a_{n\mathbf{k}}^\dagger a_{n'\mathbf{k}-\mathbf{q}} \mu_{nn'}(\mathbf{k})$$

Bandkanntechnik wie in 4.2.1.

$$\hat{H}_{\text{opt}} = \sum_{\mathbf{k}} \mu \underline{E}(t) (a_{\mathbf{k}}^\dagger d_{\mathbf{k}}^\dagger + d_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}})$$

4.3. Halbleiter Blochgleichungen

• siehe:

Zeitentwicklung folgender Größen:

Verteilungsfunktion $f^e(\mathbf{k}, t) = \langle a_{\mathbf{k}}^\dagger a_{\mathbf{k}} \rangle$

$$f^h(\mathbf{k}, t) = \langle d_{\mathbf{k}}^\dagger d_{\mathbf{k}} \rangle$$

Polarisation $\rho(\mathbf{k}, t) = \langle d_{\mathbf{k}}, a_{\mathbf{k}} \rangle$

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

- Ansatz: Bewegungsgleichung für Erwartungswerte
(Fundamentalrelation der Quantentheorie)

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

(bildunabhängig)

- Suche Kommutatoren ① $[\hat{H}, a_k^+ a_k]$ und
② $[\hat{H}, a_k^+ d_k^+]$ wobei \hat{H} der

Hamiltonoperator gegeben ist durch

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_{e-e} + \hat{H}_{e-ph} + \hat{H}_{ii} + \hat{H}_{opt}$$

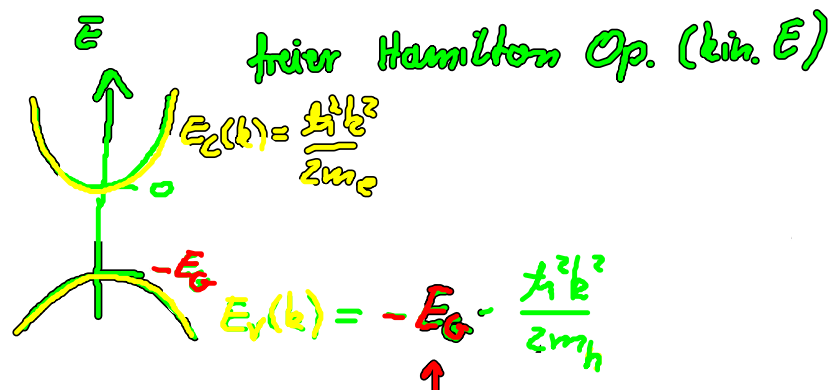
↑
↑
↑
↑

Kap 8.6.1
Kap 3.7.2
Kap 3.6.2
Kap 4.2.2.

- 1) Fall Vernachlässigung der WW Terme $\hat{H}_{e-e}, \hat{H}_{e-ph}, \hat{H}_{ii}$

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_{opt}$$

Elektron-
Loch Bild: $\hat{H}_0 = \sum_k E_c(k) a_k^+ d_k - \sum_k E_v(k) d_k^+ d_k$



Beiträge zum Kommutator ④

$$\begin{aligned}
 [\hat{H}_0, a_L^\dagger a_L] &= \sum_k \left[E_c(k) \left(\underbrace{a_k^\dagger a_k}_{\text{orange}} a_L^\dagger a_L - a_L^\dagger a_L \underbrace{a_k^\dagger a_k}_{\text{orange}} \right) - \sum_k E_v(k) (\dots) \right] \\
 &= \sum_k \left\{ E_c(k) \left(-a_k^\dagger a_L^\dagger a_k a_L + a_L^\dagger a_k^\dagger a_L a_k \right. \right. \\
 &\quad \left. \left. + \delta_{kL} a_k^\dagger a_L - \delta_{Lk} a_L^\dagger a_k - \sum_k E_v(k) (\dots) \right) \right\} \\
 &\equiv 0
 \end{aligned}$$

d.h. \hat{H}_0 liefert keine Zeitabhängigkeit von f^e oder f^h

$$\begin{aligned}
 [\hat{H}_{opt}, a_L^\dagger a_L] &= \sum_k \left\{ \mu E \left[\left(a_k^\dagger d_k^\dagger a_L^\dagger a_L - a_L^\dagger a_L a_k^\dagger d_k^\dagger \right) \right. \right. \\
 &\quad \left. \left. \underbrace{\left(d_k a_k a_L^\dagger a_L - a_L^\dagger a_L d_k a_k \right)}_{\text{orange}} \right] \right\} \\
 &= \sum_k \left\{ \mu E \left[\left(-\delta_{Lk} a_L^\dagger d_k^\dagger \right) + \left(\delta_{Lk} d_k a_L \right) \right] \right\}
 \end{aligned}$$

es gilt.

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

$$\{a_k, d_k^\dagger\} = 0$$

$$\begin{pmatrix} \{a_{kL}, a_{vL}\} = 0 \\ \{a_{kL}, a_{vL}^\dagger\} = \delta_{kL} \delta_{vL} \end{pmatrix}$$

$$= -\mu E \left(\underbrace{a_k^\dagger d_k^\dagger} - \underbrace{d_k a_k} \right)$$

Generierung von Ladungsträgern Rekombination

$$\rightarrow \langle [\hat{H}_{opt}, a_L^\dagger a_L] \rangle = -\mu E (\rho_k^*(t) - \rho_k(t))$$

WW mit \hat{H}_{opt} führt zur Ankopplung an die Polarisation

② Dynamik der Polarisation

$$\frac{d}{dt} p(t) = \frac{i}{\hbar} \langle [H, d_k a_k] \rangle$$

Beiträge zum Kommutator:

$$[\hat{H}_{opt}, d_2 a_2] = \sum_k \underline{\mu E} \left[\overbrace{(a_k^\dagger d_k^\dagger d_2 a_2 - d_2 a_2 a_k^\dagger d_k^\dagger)} + \underbrace{(d_k a_k d_2 a_2 - d_2 d_k a_k)} \right]$$

$$= \sum_k \underline{\mu E} \left[\overbrace{(a_k^\dagger a_2 d_k^\dagger d_2 - \underline{a_2 a_k^\dagger d_2 d_k^\dagger})} + 0 \right]$$

$$= \sum_k \underline{\mu E} \left(\overbrace{a_k^\dagger a_2 d_k^\dagger d_2} + \underline{a_k^\dagger a_2 d_2 d_k^\dagger} - \underline{\delta_{2k} d_2 d_k^\dagger} \right)$$

$$= \sum_k \underline{\mu E} \left(\overbrace{a_k^\dagger a_2 d_k^\dagger d_2} + \underline{a_k^\dagger a_2 d_k^\dagger d_2} + \underline{\delta_{2k} a_2^\dagger a_2} - \underline{\delta_{2k} d_2 d_k^\dagger} \right)$$

$$= \sum_k \left\{ \underline{\mu E} \left(\delta_{2k} a_k^\dagger a_2 + \underline{\delta_{2k} d_k^\dagger d_2} - \underline{\delta_{2k} \delta_{2k}} \right) \right\}$$

$$\langle [\hat{H}_{\text{opt}}, d_k a_k] \rangle = \mu E (f_c(k) + f_h(k) - 1)$$

$$= -(1-f_c)(1-f_h) + f_c f_h$$

Absorption

Emission

$$\rightarrow \text{Inversion } f_c - (1-f_h)$$

Polarisation getrieben durch klass. Lichtquelle

$$[\hat{H}_0, d_L a_L] = \sum_k \left\{ E_c(k) (a_k^\dagger a_k d_L a_L - d_L a_L a_k^\dagger a_k) - E_v(k) \right\}$$

$$= \sum_k \left(-E_c(k) \delta_{Lk} d_L a_k - (-1) E_v(k) \delta_{Lk} d_k a_L \right)$$

$$= -(E_c(L) - E_v(L)) d_L a_L$$

$\hbar \omega_p(L)$

freie Oszillation der

komplexen Polarisation mit

Übergangsfrequenz $\omega_p(k) = \frac{1}{\hbar} (E_c(k) - E_v(k))$

(i) Halbleiter Bloch-Gleichungen bei Vernachlässigung der GW Terme

$$(1) \frac{d}{dt} f_e(k,t) = \frac{1}{i\hbar} \underline{\mu} \underline{E} (p^*(k,t) - p(k,t))$$

$$(2) \frac{d}{dt} p(k,t) = \frac{1}{i} \omega_p(k) p(k,t) + \frac{1}{i\hbar} \underline{\mu} \underline{E} (1 - f_e - f_h)$$

$$(3) \frac{d}{dt} f_h(k,t) = \frac{d}{dt} f_e(k,t)$$

Rabi Frequenz

$$\Omega_p = \frac{\underline{\mu} \underline{E}}{\hbar}$$

Bem.: Kohärente Dynamik eines Ensembles
unabhängiger durch klass. Lichtquelle
getriebener 2-Niveau Systeme:
Opt. Blochgl.

Also:

Ladungsträgergeneration als kohärenter 2-Stepen Prozess
beschreibbar:

$$\underline{E} \xrightarrow[\text{erzeugt}]{(2)} p \xrightarrow[\text{generiert durch GW Ladungsträger}]{(1)} f_e, f_h$$

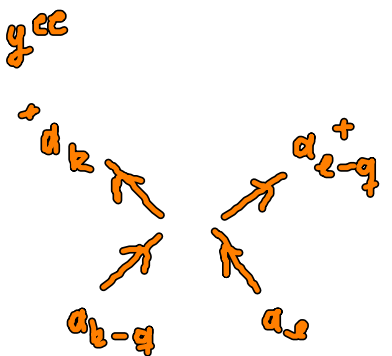
Beachte: Hartree-Fock-Näherung der Coulomb GW gibt
renormierte Übergangsfrequenz ω_p (1. Ordnung)

(ii) Berücksichtigung von \hat{H}_{ee}

$$\hat{H}_{ee} = \hat{H}_{E1-E1} + \hat{H}_{0-0} + \hat{H}_{E1-0}$$

$$[\hat{H}_{EL-EL}, a_L^\dagger a_L] = \sum_{k, k', q} \frac{1}{2} V(q) \left\{ \begin{aligned} & a_k^\dagger a_{k'}^\dagger a_{k'+q} a_{k-q} a_L^\dagger a_L \\ & - a_L^\dagger a_L a_k^\dagger a_{k'}^\dagger a_{k'+q} a_{k-q} \end{aligned} \right\}$$

∴ Vertauschungsrelationen

$$= \sum_{k, q} \frac{1}{2} V(q) \left\{ \underbrace{-a_k^\dagger a_{L-q}^\dagger a_{k-q} a_L + a_L^\dagger a_k^\dagger a_{L+q} a_{k-q}}_{g^{ee} = \langle a_k^\dagger a_{L-q}^\dagger a_{k-q} a_L \rangle} \right\}$$


$\langle [\hat{H}_{EL, EL}, a_L^\dagger a_L] \rangle$ enthält 2-Feldern Korrelation g^{ee}

also e-e Streuamplituden.

Bemerkung: Wenn $\hat{H}_{EL, EL}$ als Einbildungoperator in Hartree-Fock

Näherung verwendet wird \rightarrow verschwinden
Streuamplituden

(siehe freier Hom. Op)

Hartree-Fock entspricht Vernachlässigung von
Feldernkorrelationen

Problem: Zeitentwicklung von g^{ee} müsste durch extra DGL
beschrieben werden

→ Anknüpfung an noch höhere Korrelationskerne

→ unendliche Hierarchie von Gleichungen für n -Teilchen Korrelationen

⇒ Abbruch des Systems dyn. Gleichungen nötig

Bsp. : $y^{ee} = \langle a_{k-q}^{\dagger} a_{k'+q}^{\dagger} a_{k'} a_k \rangle$

$$\left(\delta_{q,0} \langle a_k^{\dagger} a_k^{\dagger} a_{k'} a_{k'} \rangle + \delta_{k,k'+q} \langle a_{k'}^{\dagger} a_k^{\dagger} a_{k'} a_k \rangle \right)$$

$$\approx \delta_{q,0} \langle a_k^{\dagger} a_k \rangle \langle a_{k'}^{\dagger} a_{k'} \rangle + \delta_{k,k'+q} \langle a_{k'}^{\dagger} a_{k'} \rangle \langle a_k^{\dagger} a_k \rangle$$

→ Gleichheit gilt nur für EW bezgl. antisym. Basis
⇒ hier Näherung

(2. Ordnung der Coulomb WW)

$$y^{ee} \approx (\delta_{q,0} - \delta_{k,k'+q}) f_e(k) f_e(k')$$

e-e Streuung von Elektron in Zustand k mit einem in k'

→ Gleichungssystem schließt.